

# Matemáticas y química, una relación necesaria. Desde la antigüedad al siglo XXI.

Bernardo Herradón  
CSIC

XIV Premios Jorge Juan de Matemáticas  
Universidad de Alicante  
2 de diciembre de 2011



Química



Matemáticas

- ¿Qué puede aportar la química a las matemáticas?
- ¿Qué pueden aportar las matemáticas a la química?



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

**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/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

## ¿Qué es la Química?

**La química es la ciencia que estudia la composición, estructura, propiedades y transformaciones de la materia, especialmente a nivel atómico y molecular.**

**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 que nos rodea.**

**Por lo tanto, todo es química.**



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



## "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.*
- *LA CIENCIA DE LO COTIDIANO.*



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

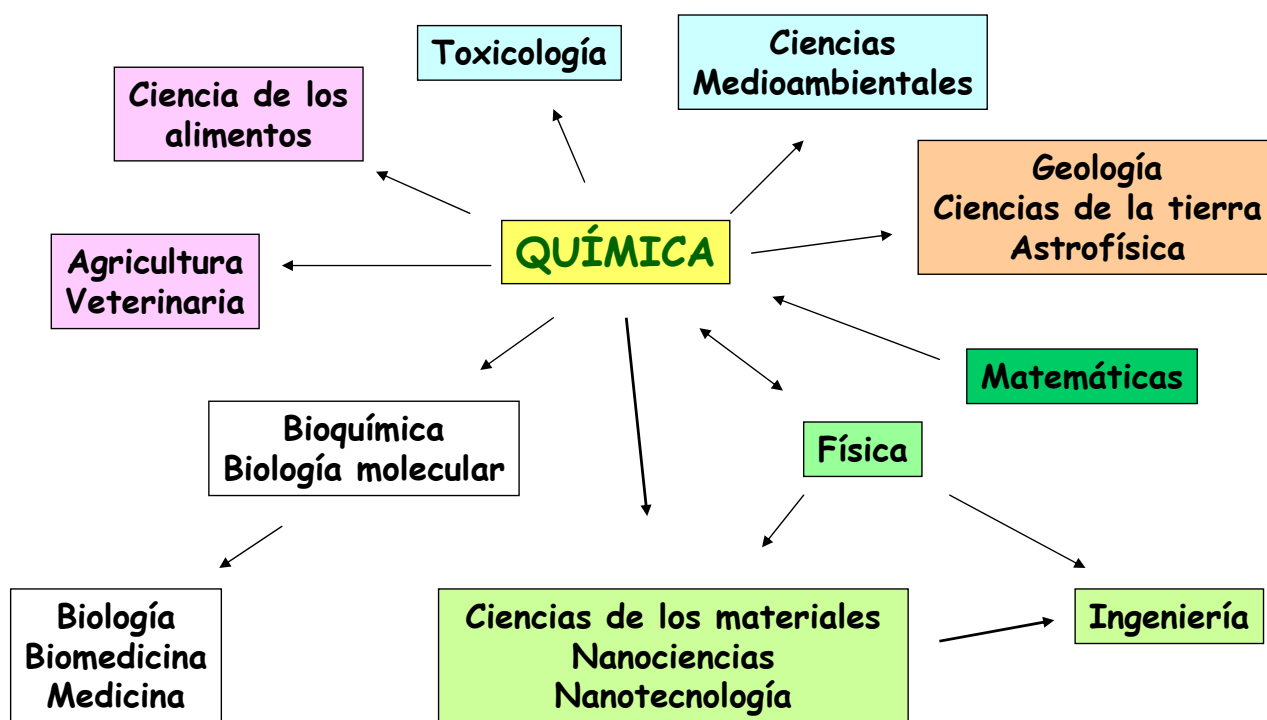
## Otras "visiones" sobre la Química

### 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 y su relación con otras Ciencias



## La Química actual y su relación con otras ciencias:

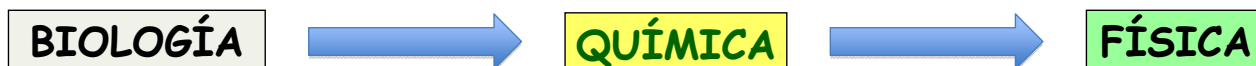
de **entre la Física y la Biología**

a

**entre la Biomedicina y la Ciencia de los Materiales**

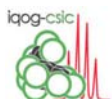


# La Química entre la Física y la Biología



¿Qué significa?

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

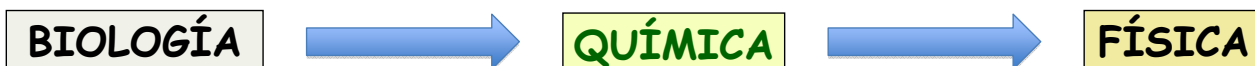


<http://www.losavancesdelaquimica.com/>

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

<http://educacionquimica.wordpress.com/>

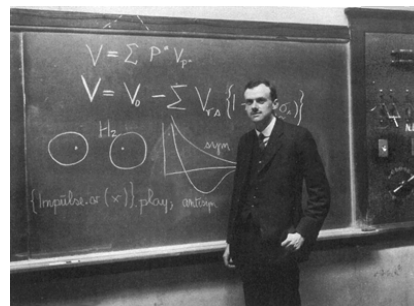
# La Química entre la Física y la Biología



¿Puede la Física explicar la Química?

¿Puede la Química explicar la Biología?

**Reduccionismo frente a autonomía**



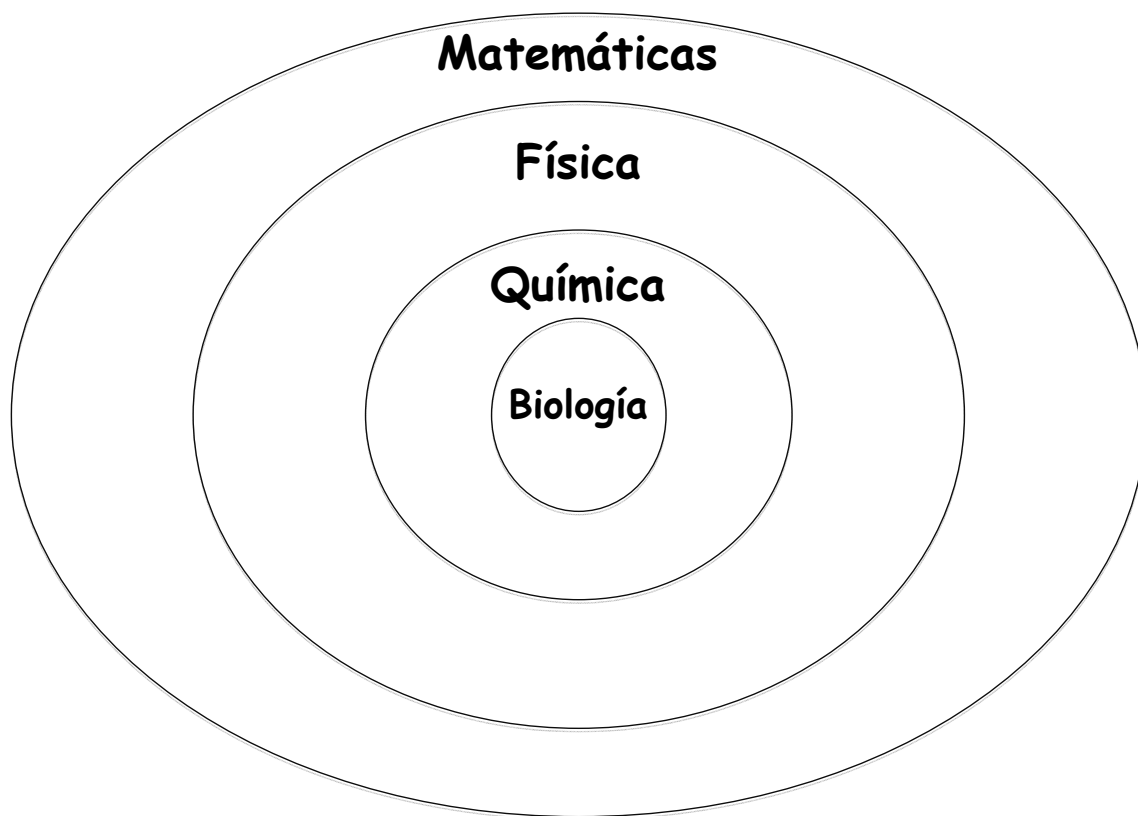
The fundamental laws necessary for the mathematical treatment of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty lies only in the fact that application of these laws leads to equations that are too complex to be solved.

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.**

# 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/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>



## 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

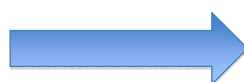


<http://www.losavancesdelaquimica.com/>  
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>



# La química, una actividad de 500.000 años

Pre-alquimia



Alquimia



Química moderna



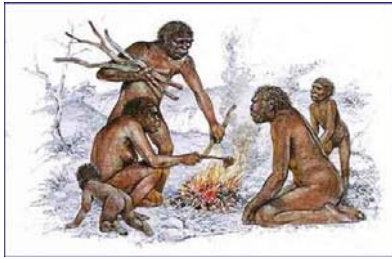
Química en desarrollo



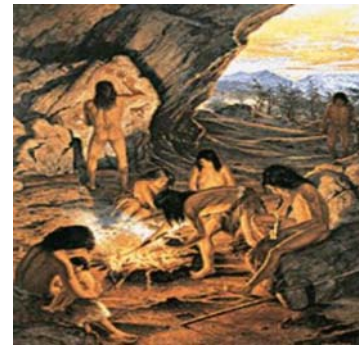
<http://www.losavancesdelaquimica.com/>  
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>



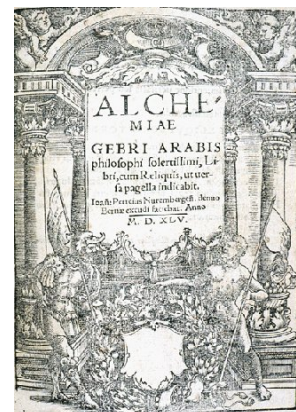
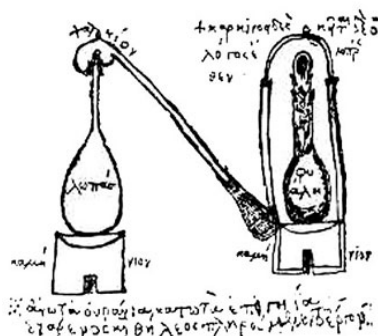
<http://www.losavancesdelaquimica.com/>  
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>



## Luz y energía



## La alquimia: una actividad de 5000 años.



Alquimia (origen árabe). Kéme (tierra, Egipto). Khemia (transmutación).  
Alquimia: el arte de la transformación

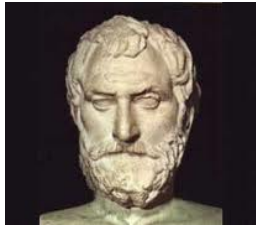
Actividad práctica: metales, cerámicas, tintes, pigmentos, ornamentación, ritos funerarios, ....

Misticismo, astrología, religión,.....

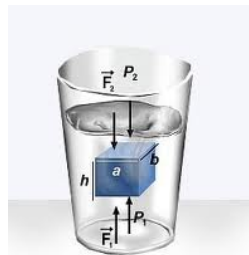
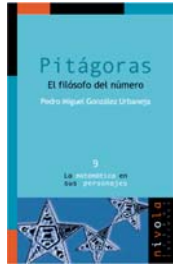
Componente filosófico, especulativo (especialmente la griega)

# 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

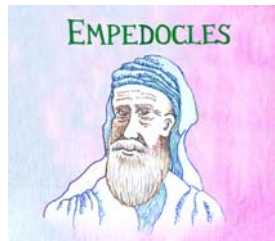
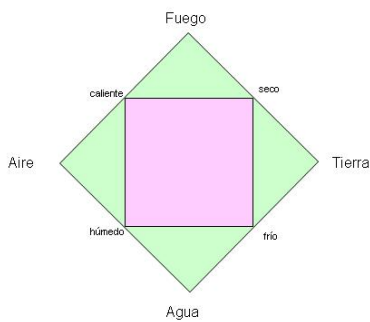


Arquímedes: "ancestro" de la Física



Demócrito

Tales de Mileto (agua)  
 Anaximandro (apeirón)  
 Anaximenes (aire)  
 Heráclito de Éfeso (fuego)



Empedocles (ca. 495-435 AC)

Atomismo (Leucipo, Demócrito)

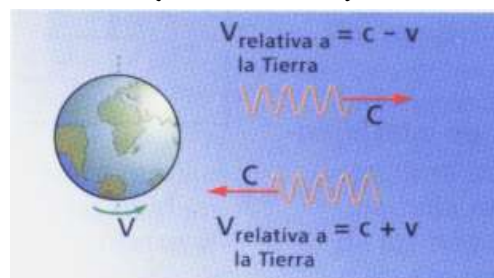


Demócrito de Abdera (460-379 AC)



Aristóteles (384-322 AC)

El quinto elemento: éter, quintaesencia (hasta 1905)





# Los sólidos platónicos y los 5 elementos

Fuego: tetraedro



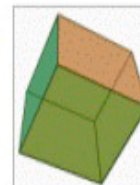
Aire: octaedro



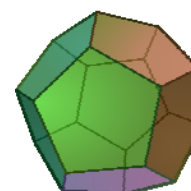
Agua: icosaedro



Tierra: cubo



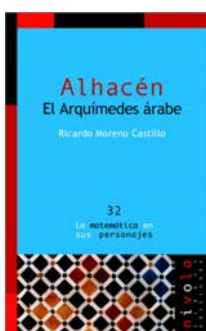
Quinto elemento: Dodecaedro



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

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

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



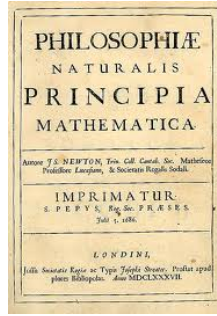
Trabajos en  
óptica



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

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

## La época dorada. Nacimiento de la Física

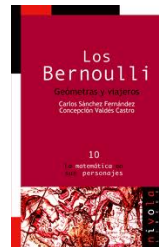


**Galileo: método científico.  
Patriarca de la Física**

**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**

## 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

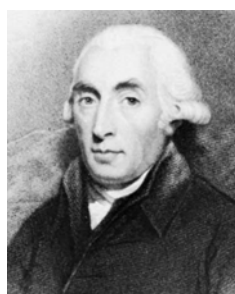
excerpt, originally published as a pamphlet in Bazas, France, 1630 [from Alembic Club reprint #11, *Essays of Jean Rey* (Edinburgh, 1895)]

## La química del siglo XVIII

Teoría del Flogisto: Un siglo de retraso conceptual



Becher (1635-1682)  
Stahl (1659-1734)



Black (1728-1799)



Priestley (1733-1804)



Cavendish (1731-1810)



Scheele (1742-1786)



# El nacimiento de la química como ciencia moderna

Lavoisier (1743-1794)



Rigor en las medidas

Identificación del papel del oxígeno

Nomenclatura

Sistematización de los conceptos químicos

Ley de la conservación de la masa

TRAITÉ  
ÉLÉMENTAIRE  
DE CHIMIE,  
PRÉSENTÉ DANS UN ORDRE NOUVEAU  
ET D'APRÈS LES DÉCOUVERTES MODERNES;  
Avec Figures:  
Par M. LAVOISIER, de l'Académie des  
Sciences, de la Société Royale de Médecine, des  
Sociétés d'Agriculture de Paris & d'Orléans, de  
la Société Royale de Londres, de l'Institut de  
Bologne, de la Société Helvétique de Basle, de  
celles de Philadelphie, Harlem, Manchester,  
Padoue, &c.

TOME PREMIER.



A PARIS,

Chez CUCHET, Libraire, rue & hôtel Serpente.

M. DCC LXXXIX.

Sous le Privilège de l'Académie des Sciences & de la  
Société Royale de Médecine.

## 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	Stibitan	46
Azure	5	Barres	66
Carbon	5	Lion	50
Oxygen	7	Zinc	56
Phosphore	9	Copper	56
Sulphur	13	Lead	90
Magnesia	20	Silver	190
Linie	24	Gold	190
Soda	28	Platina	190
Potash	42	Mercury	167



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

### 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

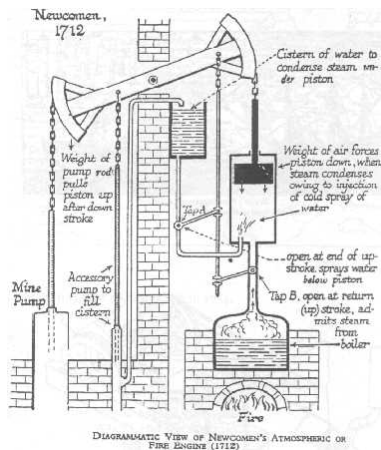
### Termodinámica

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

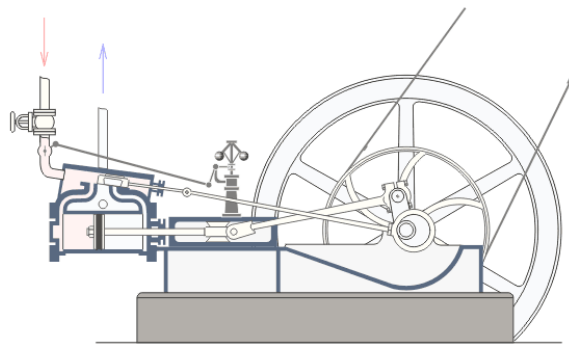
Fuentes de energía: química, solar, eólica, solar, nuclear, mecánica, mareas, etc...

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)



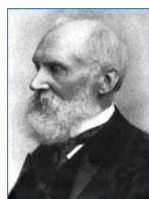
Mayer  
(1814-1878)



Joule  
(1818-1889)



Clausius  
(1822-1888)



Kelvin  
(1824-1907)



Maxwell  
(1831-1879)



Boltzmann  
(1844-1906)

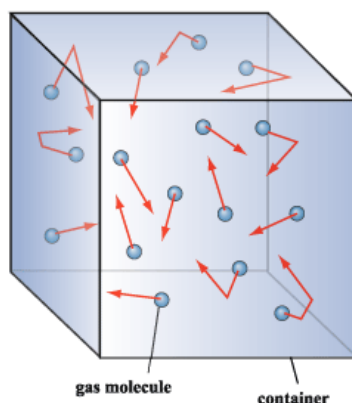
### Los principios (leyes) de la termodinámica:

- **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/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

## 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/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

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

### El nacimiento de la Química física (y Fisicoquímica)



Faraday



Ostwald



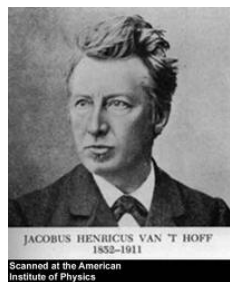
Arrhenius



Van der Waals



Nernst



Química general

Química teórica



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

## 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/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>



## 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:*

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{i} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$

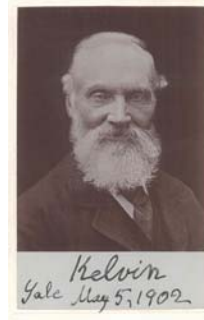
*And there was light.*

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

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

*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)



Sólo quedaban por explicar unos 'pocos' fenómenos naturales

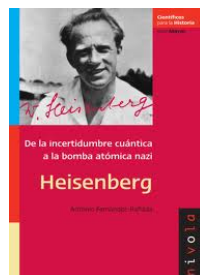
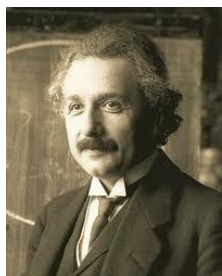
- Radiación del cuerpo negro
- Espectros de los elementos químicos
- Efecto fotoeléctrico
- Descubrimiento del electrón
- Rayos X
- Radiactividad
- Efecto Compton
- Movimiento Browniano
- Estructura del átomo (experimentos de Rutherford)



Interacciones de la materia y la energía

## 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



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

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

### 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/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>



# 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/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

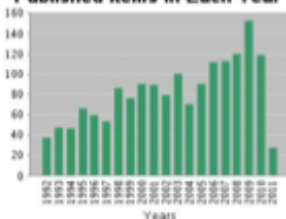
## La química matemática hoy (análisis bibliográfico, 1 de abril de 2011)

**Citation Report** Topic=(mathematical chemistry)

Timespan=All Years. Databases=SCI-EXPANDED, SSCI, A&HCI, CPCI-S, CPCI-SSH.

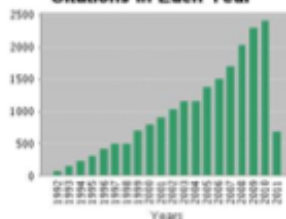
This report reflects citations to source items indexed within Web of Science. Perform a Cited Reference Search to include citations to items not indexed within Web of Science.

**Published Items in Each Year**



The latest 20 years are displayed.  
[View a graph with all years.](#)

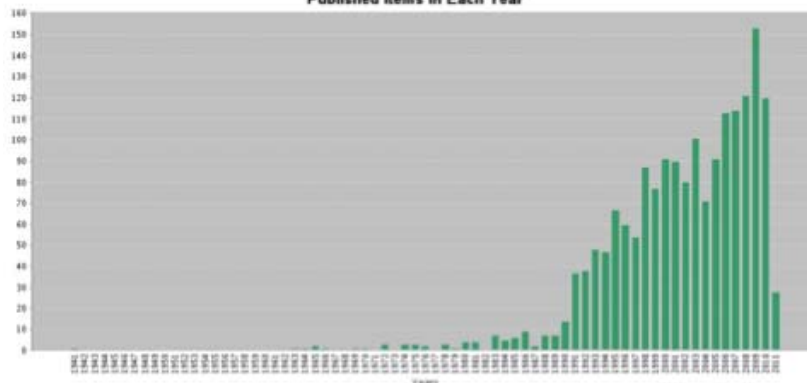
**Citations in Each Year**



The latest 20 years are displayed.  
[View a graph with all years.](#)

Results found: 1,776  
Sum of the Times Cited [?]: 20,307  
[View Citing Articles](#)  
[View without self-citations](#)  
Average Citations per Item [?]: 11.43  
h-index [?]: 62

**Published Items in Each Year**



# La química matemática hoy (análisis bibliográfico)

## Artículos (originales) más citados

### Tomographic imaging of molecular orbitals

J. Itatani<sup>1,2</sup>, J. Levesque<sup>1,3</sup>, D. Zeldler<sup>4</sup>, Hiromichi Mikura<sup>1,4</sup>, H. Péplín<sup>1</sup>, J. C. Kleffer<sup>1</sup>, P. B. Corkum<sup>1</sup> & D. M. Villeneuve<sup>1</sup>

<sup>1</sup>National Research Council of Canada, 100 Sussex Drive, Ottawa, Ontario K1A 0R6, Canada

<sup>2</sup>University of Ottawa, 150 Louis Pasteur, Ottawa, Ontario K1N 6N5, Canada

<sup>3</sup>INRS-Énergie et Matériaux, 1650 boulevard Lionel-Boulet, CP 1020, Verennes, Québec J3X 1S2, Canada

<sup>4</sup>PRESTO, Japan Science and Technology Agency, 4-1-8 Honcho Kawaguchi Saitama, 332-0012, Japan

*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 alignments, we accomplish a tomographic reconstruction of the highest occupied molecular orbital of N<sub>2</sub>. The method also allows us to follow the attosecond dynamics of an electron wave packet.

### Collisional Breakup in a Quantum System of Three Charged Particles

T. N. Rescigno,<sup>1</sup> M. Baertschy,<sup>2</sup> W. A. Isaacs,<sup>3</sup> C. W. McCurdy<sup>2,3</sup>

Since the invention of quantum mechanics, even the simplest example of the collisional breakup of a system of charged particles,  $e^- + H \rightarrow H^+ + e^- + e^-$  (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 correct 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 289

### 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://educacionquimica.wordpress.com/>

SpringerLink

SEARCH FOR   Advanced Search Search Tips

AUTHOR OR EDITOR PUBLICATION VOLUME ISSUE

PAGE SPRINGERLINK BROWSE TOOLS HELP SHOPPING CART LOG IN

CETEF Centro de Tecnologías

Journal About

Search Within This Journal

Browse This Journal Show Filters

Online First™ Open Access Samples

Contemporary Content

Volume 49

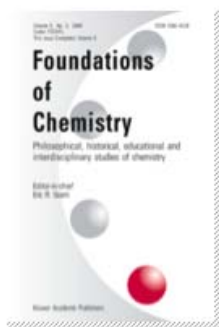
Number 4 / April 2011	821-970
Number 3 / March 2011	619-820
Number 2 / February 2011	375-617

Journal of Mathematical Chemistry

Volume 1 / 1987 - Volume 49 / 2011

Volume 49, Number 4 / April 2011

Viewing all 8 articles



## Foundations of Chemistry

Philosophical, Historical, Educational and Interdisciplinary Studies of Chemistry

Editor-in-Chief: Eric E.R. Scerri

ISSN: 1386-4238 (print version)

ISSN: 1572-8463 (electronic version)

Journal no. 10698



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

**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)

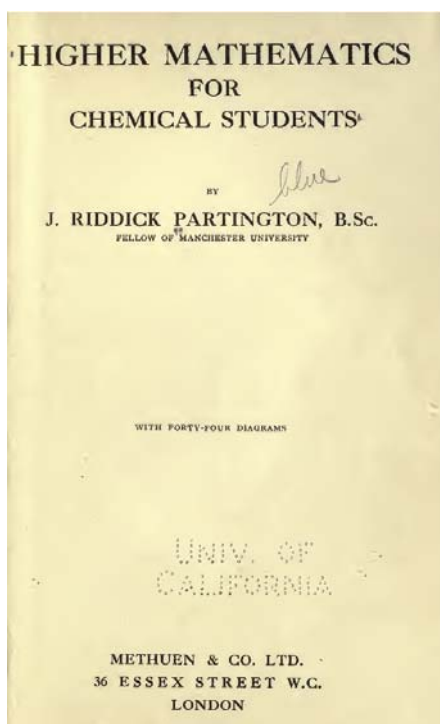


<http://www.losavancesdequimica.com/>  
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

# ¿Qué enseñan los libros de matemáticas para químicos?



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

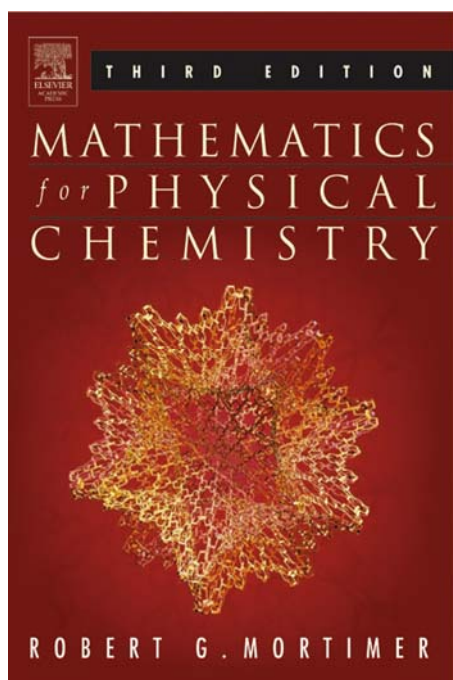


## Partington (1911)

- 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/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>



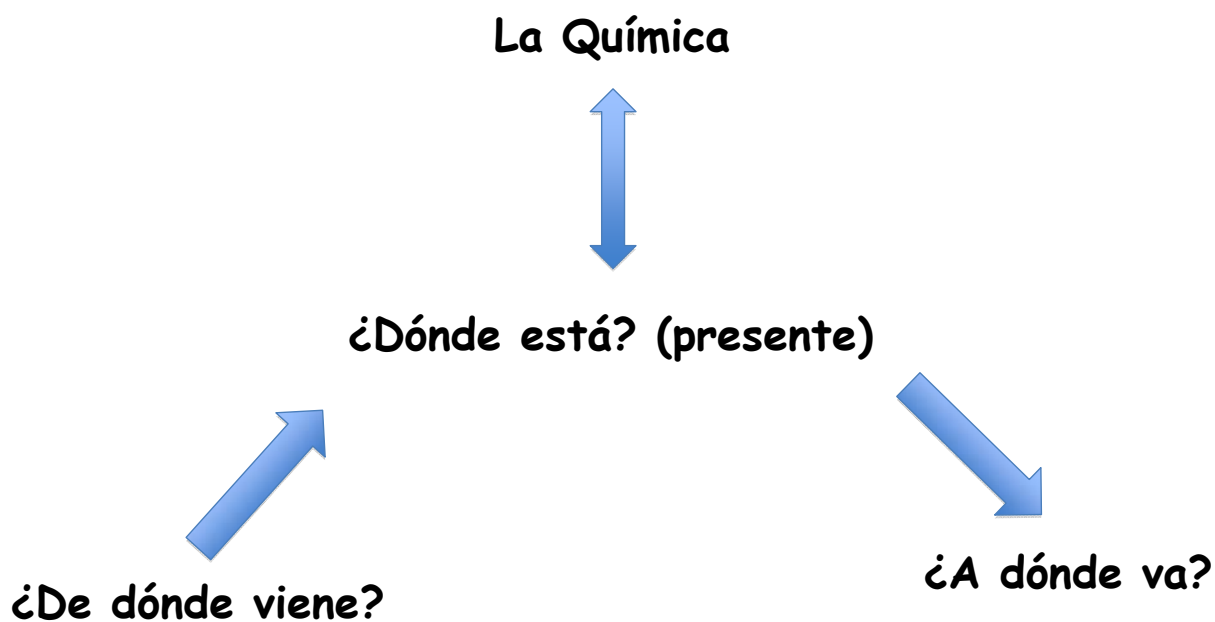
## Mortimer (2005)

- 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



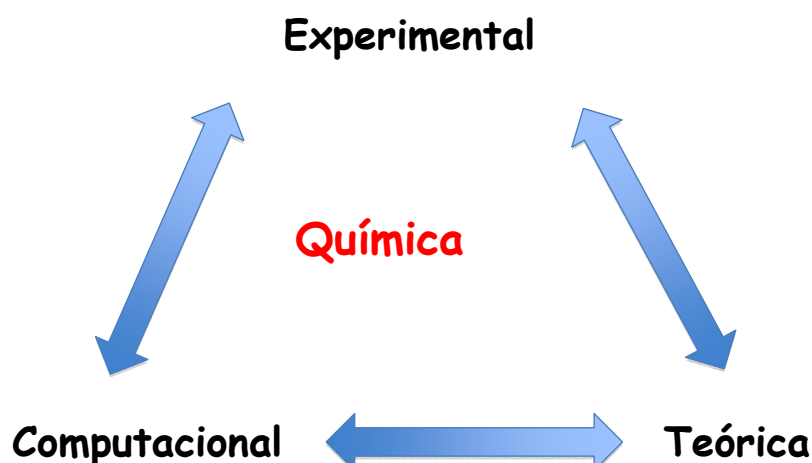
<http://www.losavancesdelaquimica.com/>  
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

## La Química del futuro



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





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

**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/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>



Para alcanzar estos objetivos necesitaremos  
herramientas teóricas que permitan:

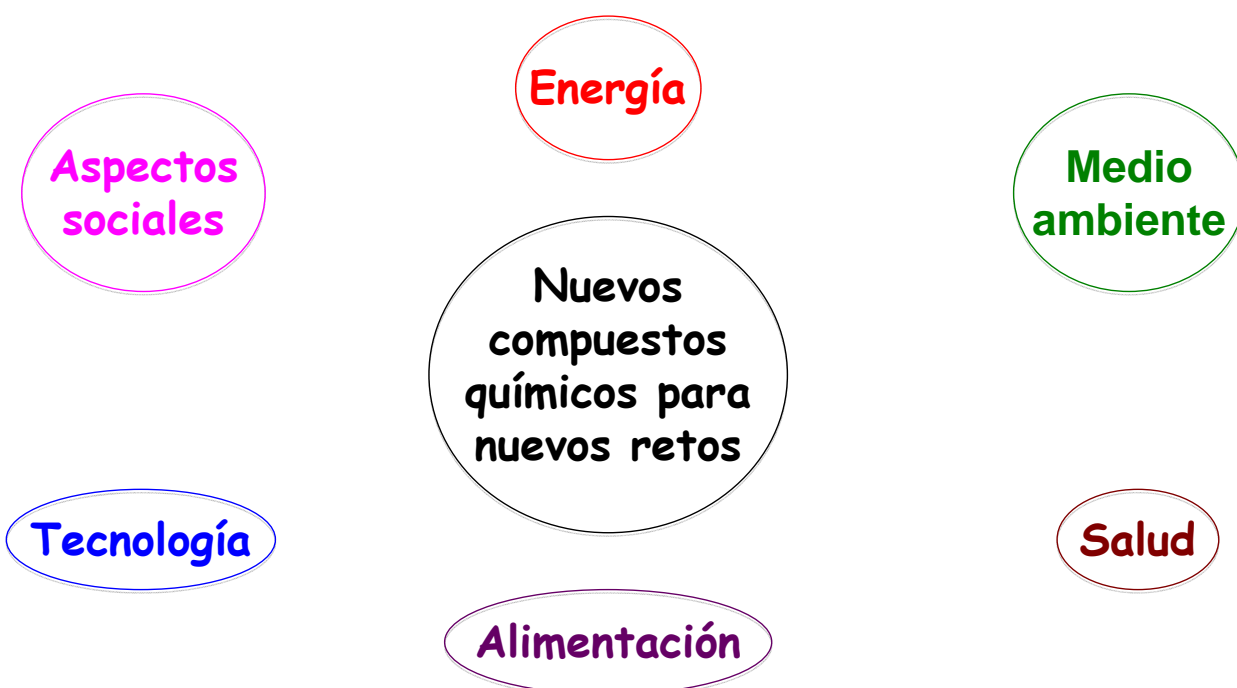
Predecir resultados  
Interpretar resultados

**EL PAPEL DE LAS MATEMÁTICAS SERÁ  
FUNDAMENTAL**



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

## La Química del futuro



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

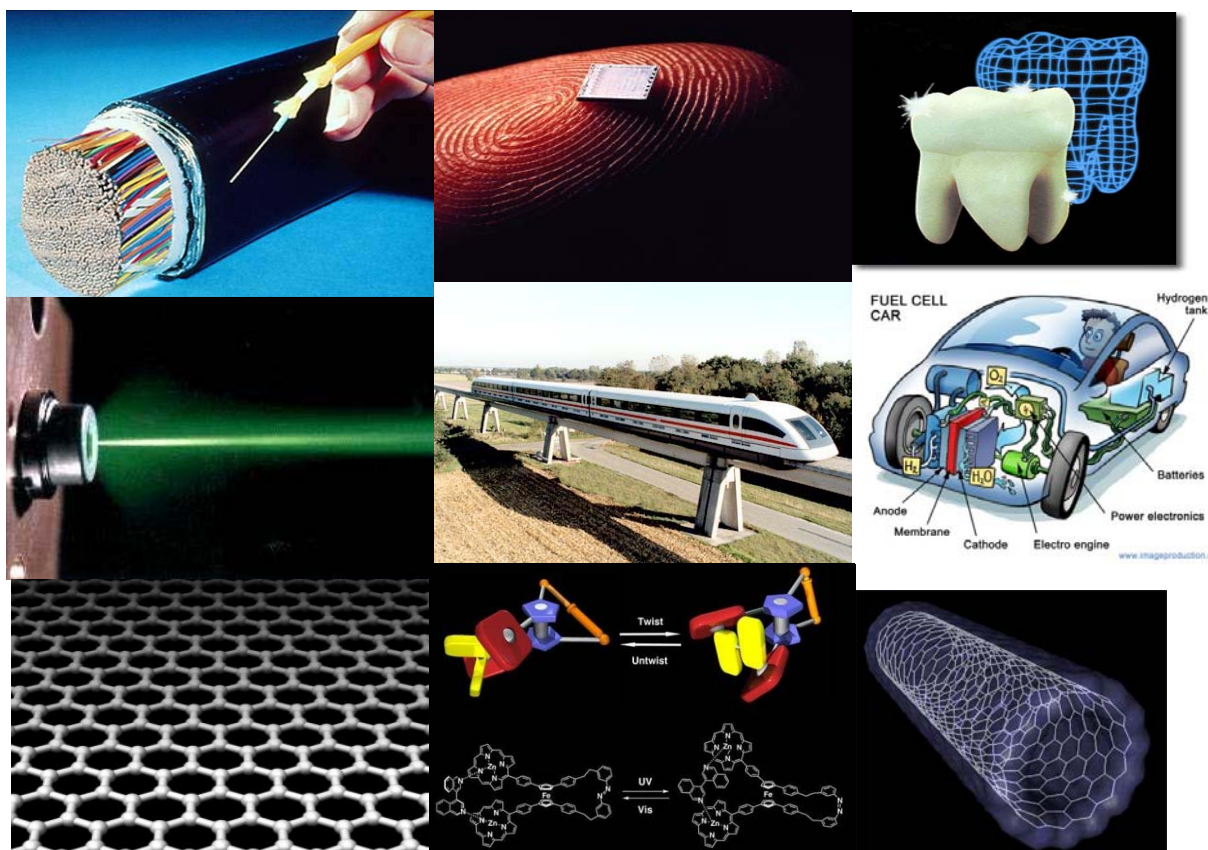
Dependeremos de procesos y materiales  
(formados por moléculas) adecuados

## LA QUÍMICA Y LOS MATERIALES DEL "FUTURO"

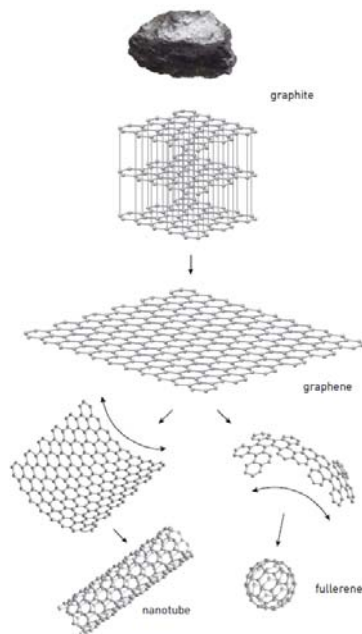


<http://www.losavancesdequimica.com/>  
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

### Nuevos Materiales (s. XXI)



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



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

## 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.

*Geometry of Chemical Graphs: Polycycles and Two-faced Maps*  
Deza y Sikiric; 2008

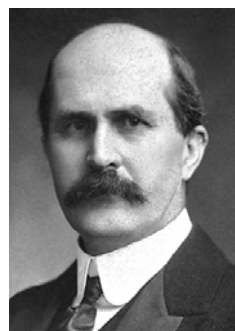
## Cristalografía. Difracción de rayos X.



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

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

## Simetría

Cristalografía

Química cuántica y computacional

Espectroscopía

Estructura química

Complejos de metales de transición. Teoría del campo cristalino.

Orbitales

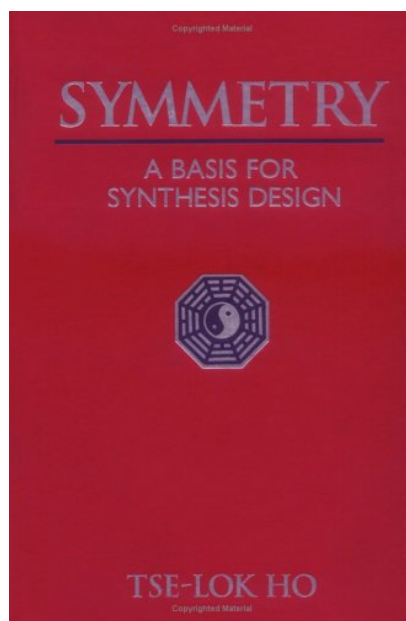
Síntesis orgánica



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

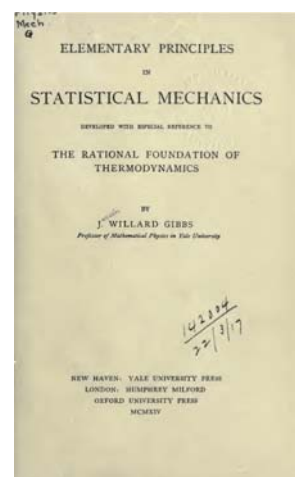
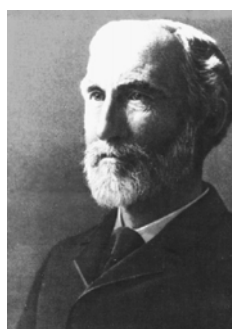
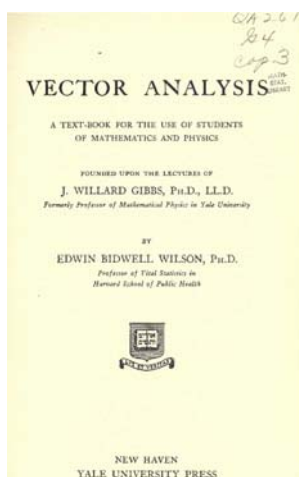


La simetría: un concepto útil en Química orgánica ('el mundo de lo asimétrico') y poco explotado.



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

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



## 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.

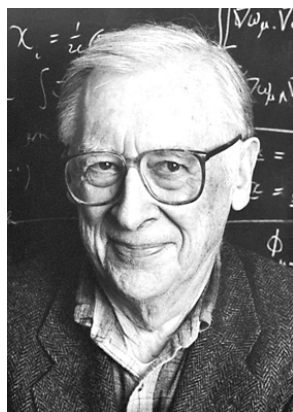
**Estructura:** Simbolismo, representación (fórmulas y reactividad), simetría, relaciones topológicas, teoría de grupos, grafos, cristalografía, espectroscopía, etc.

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

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

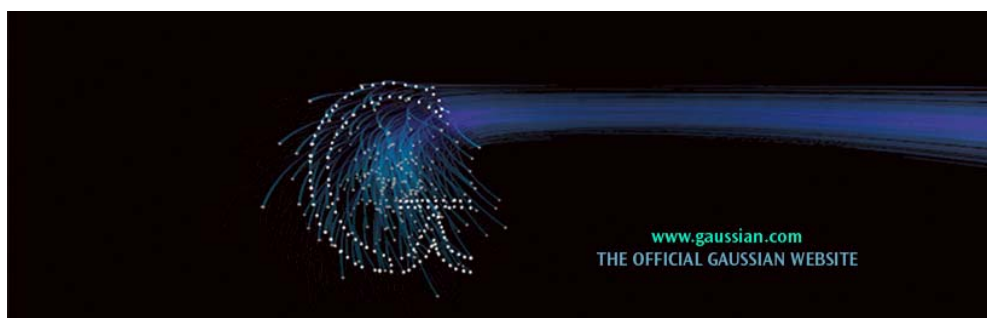


<http://www.losavancesdelaquimica.com/>  
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>  
<http://educacionquimica.wordpress.com/>



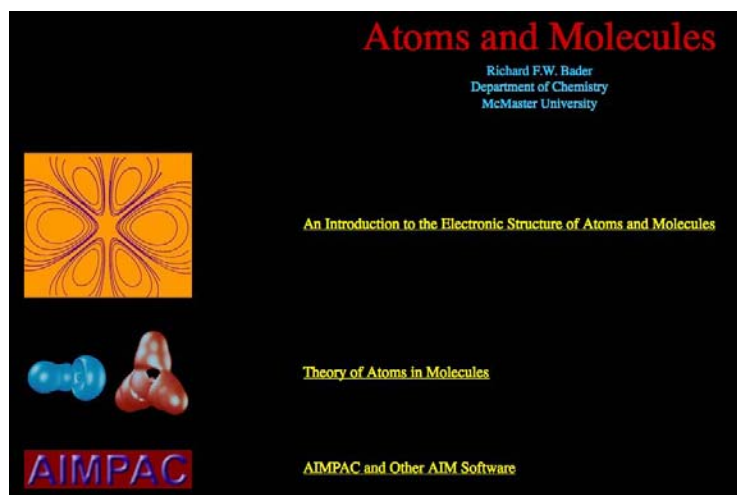
**John Pople (1925-2004)**  
**Premio Nobel de Química (1998)**  
**Matemático.**

**Desarrollos en química cuántica y computacional**  
**Algoritmos de cálculo.**  
**Gaussian**



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

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.

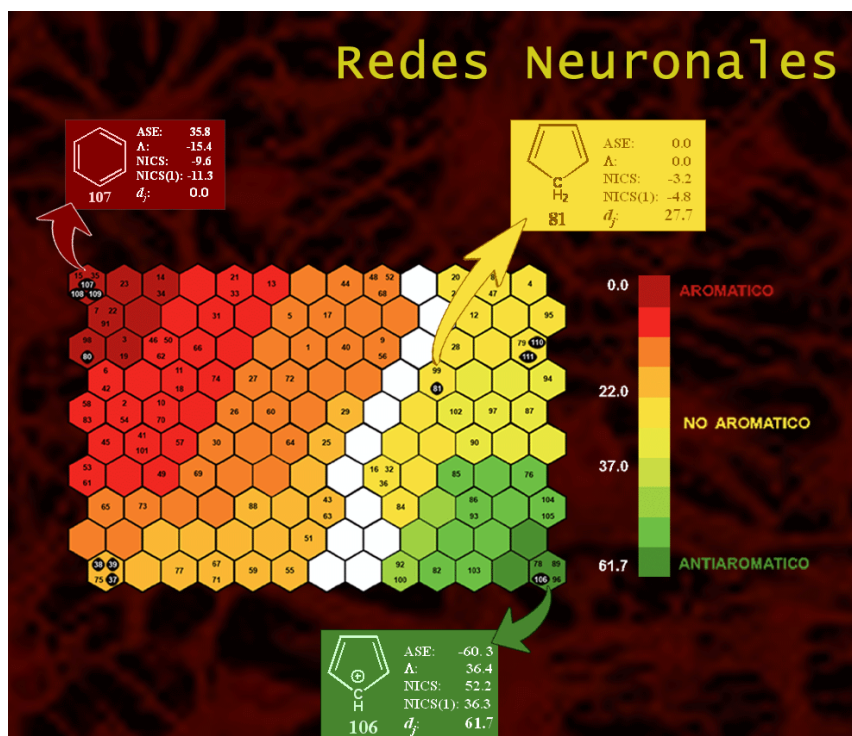
Pueden ser supervisados o no supervisados, según se quieran ajustar los datos a unos resultados o no.

Se puede variar la arquitectura y topología de la red.

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

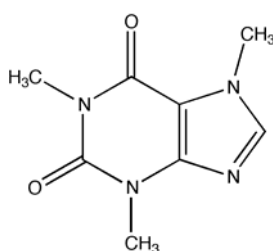
La mayoría de los químicos lo usamos como una *caja negra*.

## Aromaticidad a través de redes neuronales

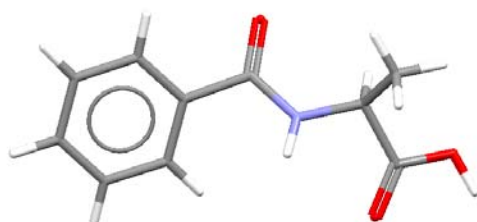


Alonso y Herradón (IQOG-CSIC)

## 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

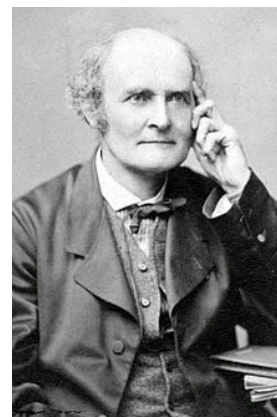
D.H. ROUVRAY

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

(Received 15 June 1988)

### 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 structure in purely mathematical terms, they established that an isomorphism exists between the structures of individual chemical molecules and mathematical graphs. They thereby first demonstrated the relevance of the graph in the chemical context. Cayley made use of graphs in the enumeration of constitutional isomers for the members of the alkane 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 now seen to have been immense. In particular, recent years have witnessed a dramatic growth in the various applications of chemical graph theory. Papers exploiting the concept of the chemical graph are currently appearing at the rate of almost 600 per annum.



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

## 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.





# La revista de matemáticas de los estudiantes

[Inicio](#) [¿Quiénes somos?](#) [Participa](#) [Números](#) [Reparación](#) [Distribución](#)

**¿Cómo publicar?**  
Si quieres publicar en la revista es necesario que escribas en LaTeX. Para ello hemos preparado esta [plantilla](#) con la cabecera que utilizamos en la revista. Además, te pedimos que sigas la [guía de estilo](#) para dar unicidad a la revista. Más información [aquí](#)

## Números publicados

### Número 1



¡Ya ha llegado el nuevo número de Matgazine! Tras la estupenda acogida del número 0, decidimos en el equipo seguir adelante con la iniciativa y, tras realizar los exámenes, pusimos en marcha este número. Lo primero de todo es agradecer a los estudiantes que han colaborado con la revista, ya sea escribiendo artículos ...

[Leer más](#)

**Matgazine** on Facebook  
Like You like this.

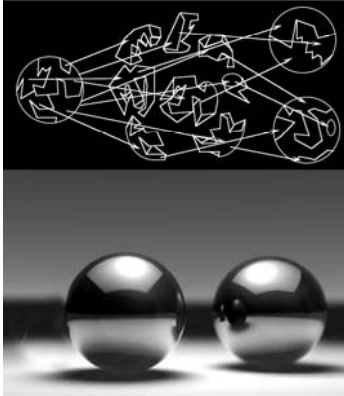
**Matgazine**  
Las matemáticas de Numb:  
.D  
<http://numb3rs.wolfram.com/season1.html>

Pinchad en los términos que aparecen en rojo debajo de cada capítulo, en "Math user" para tener más información respecto ^^

*Season 1: NUMB3R*



## número 1



Asociación cultural Linares Corral,  
Facultad de CC. Matemáticas, Universidad Complutense de Madrid

<http://matgazine.tk/>

**Bernardo Herradón**  
**@QuimicaSociedad** España  
Investigador en el CSIC, al que le apasiona la comunicación científica y la química.  
<http://www.lasavancesdelaquimica.com/>

Envía follow QuimicaSociedad por mensaje de texto al código corto de tu proveedor

Seguir

Tweets Favoritos Siguiendo Seguidores Listas

**QuimicaSociedad** Bernardo Herradón  
Las otras facetas de la química. Comentarios a los artículos publicados en Nature Chemistry. [bit.ly/r8FXJA](http://bit.ly/r8FXJA) via @addthis  
hace 1 hora

**QuimicaSociedad** Bernardo Herradón  
Interesante entrevista a Higuera. Sobre el mercurio y sus problemas ambientales. A Hombres de Gigantes (RNE5). Se repite el domingo a 10.  
17 sept.

facebook

Search

**Bernardo Herradón**  
Investigador at CSIC Studied at Universidad Complutense de Madrid Lives in Madrid, Spain From Madrid, Spain Born on October 27, 1958 Add languages you know Edit Profile

Introducción del perfil de sus amigos

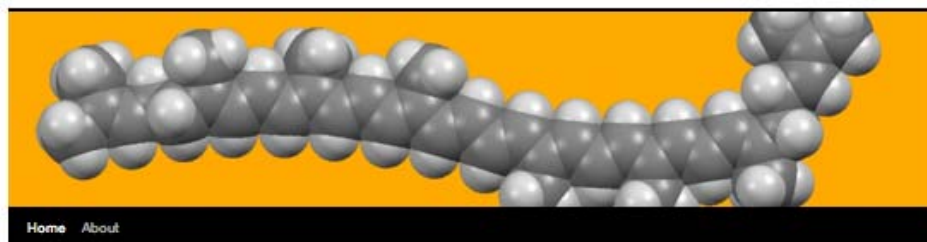
Update Status Add Photo Ask Question

What's on your mind?

**Bernardo Herradón**  
Comentarios a los artículos publicados en Nature Chemistry

Las otras facetas de la química  
[www.madrimasd.org](http://www.madrimasd.org)

Como una de las acciones relacionadas con el Año Internacional de la Química, la edición de septiembre de la revista Nature Chemistry publica un dossier con siete artículos abordando aspectos de la química más allá del trabajo en el laboratorio



[Home](#) [About](#)

## Tabla periódica gigante

Posted on October 21, 2011 by educacionquimica

Los alumnos del IES Valle del Saja de Cabezón de la Sal (Cantabria) han realizado una tabla periódica gigante con información de cada uno de los elementos químicos. El trabajo ha sido dirigido por Covadonga Gutierrez y Alberto Aguayo.

Seguro que la experiencia ha sido muy satisfactoria para todos, los profesores y alumnos; y éstos han aprendido muchísimo al hacerla.

La tabla periódica completa tiene un tamaño considerable y de hecho, la foto completa se ha tenido que obtener a trozos (disculpad por la calidad de la imagen; podéis verla en tamaño más grande pinchando sobre la imagen).



### Búsqueda

### Posts recientes

Tabla periódica gigante  
Tabla periódica  
Luis Federico Leloir (1911-1987)  
Libros de física (de interés para los químicos)  
Curso de Nanotecnología  
Elementos químicos: el hidrógeno.  
La tabla periódica de los artistas  
Lecturas químicas para el verano: elementos químicos.  
La química de los alimentos.  
Educoorantes nutritivos.  
La química de los alimentos.  
Definición y clasificación de educoorantes.

### Comentarios



eft on Libros de física (de interés p...



América Valencuela on La tabla periódica de los...



Polimerización... on Polimerización



educacionquimica on La tabla periódica de los...



GasNz on La tabla

**mi+** Un lugar para la ciencia y la tecnología

## Los avances de la química y su impacto en la sociedad

En el blog se tratan aspectos relacionados con la química (avances, aplicaciones, noticias, historia, etc.), especialmente en relación con las actividades educativas, formativas y de política científica.

BLOGS madri+d

PORTADA BLOG

GALERIAS IMAGENES

La Ciencia española no necesita tijeras

Yo colaboro con Journal of Feelsynapsis

## ¿Químicos ayudando a la química?

Publicado por **Bernardo Herradón** el 29 noviembre, 2011

Comentarios (1)

Like Be the first of your friends to like this.

Hacia tiempo que no tenemos noticias de este tipo.

**Público.es**

Bienvenida

Portada Opinión Internacional España Catalunya Dinero **Ciencias** Culturas Deportes  
Planeta Tierra La ciencia es

Sonando

## Los protectores solares invaden los ríos españoles

Contaminantes en los ríos Guadalquivir, Júcar, Ebro y Llobregat amenazan la fauna

NUÑO DOMÍNGUEZ | MADRID | 28/11/2011 22:00 | Actualizado: 28/11/2011 22:44

4 Comentarios Media: 5 Votos: 1

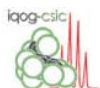
### Buscar



### BERNARDO HERRADÓN

Doctor en Ciencias Químicas (UCM, 1986). Actualmente es Investigador Científico en el Instituto de Química Orgánica General (IQOG) del CSIC. Ha sido Director del IQOG entre 2006 y 2010. Ha investigado en la Universidad de Alcalá, ETH-Zürich y Stanford University. Sus temas de investigación abarcan un amplio rango de la Química Orgánica, incluyendo la síntesis orgánica, compuestos bioactivos, estructura e interacciones de compuestos aromáticos y péptidos, y toxicología computacional. Entre sus objetivos está la difusión de la Cultura Científica, especialmente, entre estudiantes de ESO y Bachillerato, participando en ferias científicas, visitas guiadas, mesas redondas, charlas y cursos de divulgación, etc. Dirige el curso de divulgación "Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad" y es el Comisario Científico de la exposición "Entre Moléculas" elaborada en el CSIC.





CSIC  
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

LOS AVANCES DE LA QUÍMICA

Fundación BBVA

Inicio

Año Internacional de la Química-2011

I Curso de divulgación "Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad"

II Curso de divulgación "Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad"

Química y matemáticas  
Química-2012



## AÑO INTERNACIONAL DE LA QUÍMICA-2011



El Año Internacional de la Química en el Campus de Cantoblanco del CSIC.

La exposición 'Entre moléculas' llega al campus de Cantoblanco del

Buscar...

- Anuncios
- Artículos
- Contacto
- Divulgación, Conferencias
- Educación y Cultura Científica
- Actividades
- Enseñanza
- Efemérides



CSIC  
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS



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

# III CURSO DE DIVULGACIÓN "LOS AVANCES DE LA QUÍMICA Y SU IMPACTO EN LA SOCIEDAD"

A partir de septiembre de 2012



Año Internacional de la  
**QUÍMICA**  
2011

CSIC  
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS



Asociación Territorial de Madrid



CSIC  
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS



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

# 2011: Año Internacional de la Química



Año Internacional de la  
**QUÍMICA**  
2011



United Nations  
Educational, Scientific and  
Cultural Organization



International Union of  
Pure and Applied  
Chemistry



**Química,  
nuestra vida,  
Nuestro futuro**

**Marie Curie**  
**Premio Nobel (1903, 1911)**



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