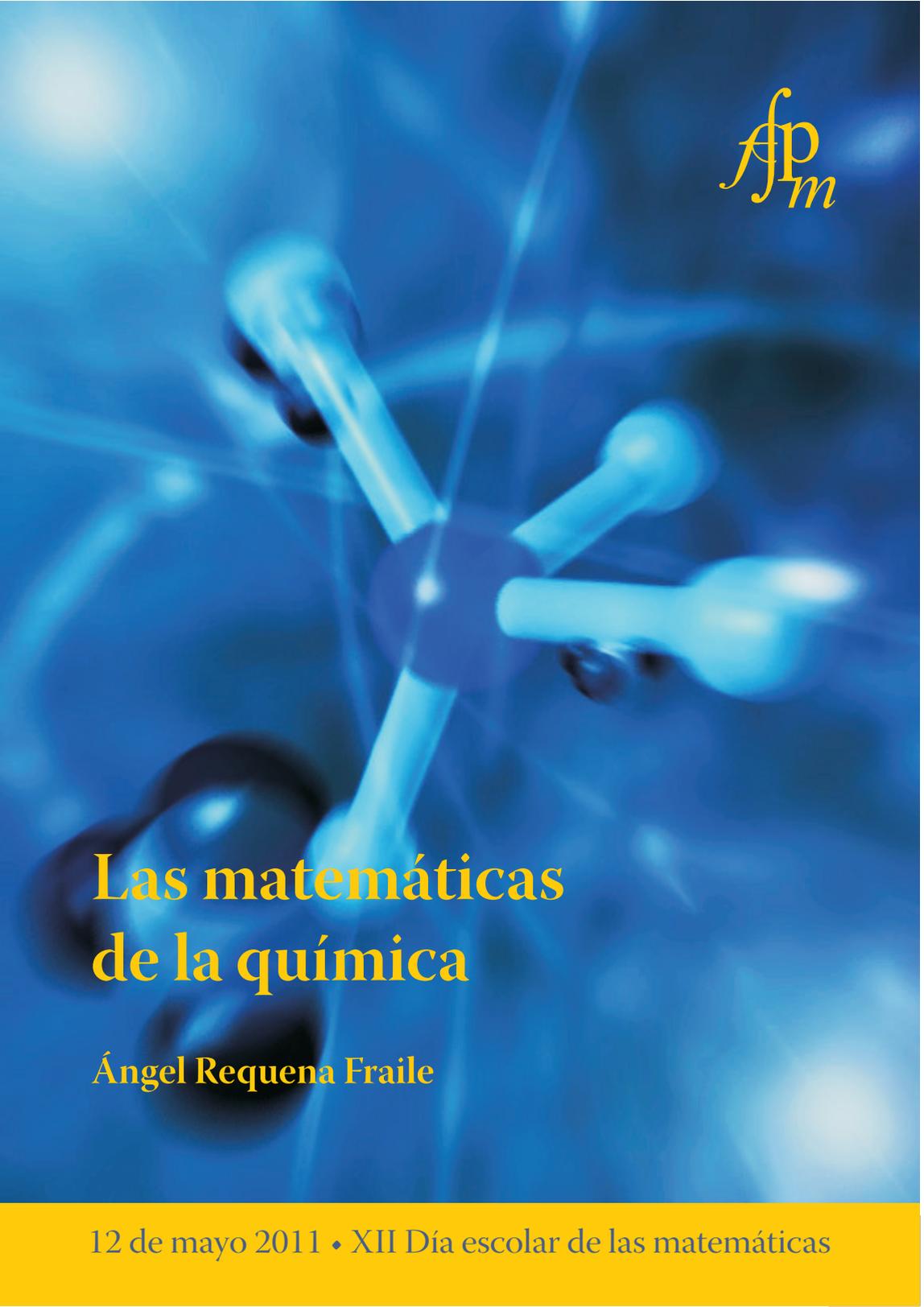




AP_m



Las matemáticas de la química

Ángel Requena Fraile

12 de mayo 2011 • XII Día escolar de las matemáticas



Año de la química y de la matemática



International Year of **CHEMISTRY** 2011

El 31 de diciembre de 2008 la Asamblea General de la Organización de las Naciones Unidas, ONU, proclamó al año **2011** como el **Año Internacional de la Química** para poner de manifiesto las contribuciones de esa ciencia al bienestar de la humanidad. Ese año coincide con el centenario del Premio Nobel de Química otorgado a Marie Curie.

La ONU concreta los motivos en la declaración siguiente:

La educación química es esencial para solucionar los enormes retos que actualmente enfrenta la humanidad para su supervivencia, como son el cambio climático, la producción suficiente de agua limpia, de alimentos y de energía, así como la conservación del medio ambiente.

El desarrollo y aplicación de la química hace posible la producción de medicinas, combustibles y prácticamente todos los productos necesarios en nuestra vida diaria. El año 2011 ofrece la oportunidad de celebrar las contribuciones de las mujeres a la ciencia.

Si el universo está escrito en lenguaje matemático –como manifestó Galileo– la química no es una excepción. Precisamente la química se consolida como ciencia al construirse según la costumbre geométrica que fue el modelo de ciencia durante la Ilustración.

La matematización de la química fue tardía –por dificultades que veremos– pero no menos contundente que la que se había dado un siglo antes en la física.

La **Federación Española de Sociedades de Profesores de Matemáticas** empezó a celebrar el Día escolar de las matemáticas precisamente el año **2000**, en el que se celebró **Año Mundial de las Matemáticas**. Por eso no hemos querido faltar a la cita con el Año de la Química, dedicando el Día escolar 2011 a *Las matemáticas de la química* desde la convicción de que el acercamiento entre las ciencias las fertiliza y favorece su conocimiento.

La omnipresencia de la matemática en el mundo natural es para algunos un gran misterio, aunque muy a menudo sea una presencia oculta. Desvelar los secretos de la naturaleza es siempre apasionante.



La aritmetización de la química tiene lugar en Segovia

El esfuerzo de modernización que se produce durante el siglo XVIII en la decadente España –para sacarla de su letargo– hace que la corona contrate científicos y artesanos en el exterior. Así el químico francés Louis Proust va a trabajar primero en Vergara, después en la Academia de Artillería de Segovia y por último en Madrid.

Proust dispone de laboratorio químico en el Alcázar de Segovia, allí pasará la fase más productiva de su carrera, y formulará la ley que cuantificará la química. La escurridiza química se convertirá en Segovia en una ciencia matemática entre 1794 y 1799.

Antes que las leyes de Proust se habían formulado cuantificaciones parciales como la ley de Boyle de los gases, pero la química estaba muy lejos de ajustarse al modelo newtoniano de la física.

Frente a la concepción de Berthollet, el químico heredero de Lavoisier, que postulaba la variabilidad de las proporciones de los elementos, Proust formula la ley de las proporciones definidas. Demuestra la equivocación de Berthollet al considerar óxidos a compuestos hidratados. Trabajando con los óxidos de hierro y mercurio encuentra que solo hay dos tipos de compuestos, cada uno de ellos con un porcentaje en peso (estequiométrico) de hierro fijo.

Hoy, conociendo la teoría atómica, vemos muy elemental que existan dos óxidos, -FeO y Fe_2O_3 – y, en cada caso, podemos calcular, conocidos los pesos, la proporción de hierro para cada óxido. Pero la ciencia trabaja al contrario: para llegar a la fórmula primero hay que establecer la proporcionalidad fija y ese es el mérito de Proust en su laboratorio segoviano.



Louis Proust (1754-1826)

Ley de Proust, ley de las proporciones constantes o ley de las proporciones definidas

Cuando se combinan dos o más elementos para dar un determinado compuesto, siempre lo hacen en una relación de masas constantes.



Newton, el matemático alquimista

El caso del padre de la ciencia moderna, Isaac Newton, ejemplifica perfectamente las dificultades de orden técnico y psicológico para hacer de la química una ciencia moderna, es decir, matematizada.

La **Matemática** alcanza su mayoría de edad en el mundo helenístico con los *Elementos* de Euclides, la **Astronomía** madura como ciencia matemática en la misma época con Hiparco y después con Ptolomeo. La **Mecánica** se hace matemática con Galileo pero se plasma al modo euclídeo en los *Principia Mathematica* de Newton a finales del XVII. La fundamentación matemática de la **Química** se retrasa todavía un siglo, hasta que Lavoisier arruina la teoría del flogisto y establece el oxígeno como elemento.

Newton creó el cálculo diferencial e integral, llamándolo *teoría de las fluxiones*, y lo aplicó a la mecánica, desarrolló la teoría de la gravitación, y culminó en su *Óptica* la geometrización que había comenzado el mismo Euclides.

Imaginemos ahora a ese racionalista y moderno Newton encerrado en su laboratorio alquímico, buscando los misterios ocultos de las transmutaciones y empleando un lenguaje que no tiene nada que ver con la sobriedad del lenguaje de la ciencia. Así en su principal manuscrito, titulado *Praxis*, libro de anotaciones al *Triomphe hermétique* del francés Didier, Isaac utiliza la lengua misteriosa propia de magos:

Capítulo 1: Sobre el semen de la materia

Había dragones de fuego en un campo negro, la hembra volaba, y el varón sin alas, los principios de la filosofía, las serpientes mueven los mensajes ♀ (mercurio) y ♂ (azufre), ☾ (plata) y ☉ (oro), los dragones que guardan las manzanas de las Hespérides.

La simbología newtoniana y sus metáforas eran alquimistas y astrológicas: la plata es la luna, el sol es el oro, el mercurio es el mismo planeta... de aquí que aparezcan las estrellas Hespérides.

Tanto Boyle como Newton seguían creyendo en la transmutación. Por los papeles que tratan de alquimia es seguro que Newton dedicó muchísimo tiempo a familiarizarse con los principios de la alquimia medieval. En su honor hay que decir que no llegó a publicar nada. Al economista Keynes debemos el estudio del Newton oculto.



Música y matemáticas en la Tabla periódica

El establecimiento de la *Tabla periódica de los elementos* se hizo esperar hasta los años sesenta del siglo XIX. Hacia 1830, cuando Mendeléiev empezó a pensar en una posible clasificación de los sesenta elementos conocidos en aquel momento, todo era difícil de encajar. Se desconocía el número atómico, los pesos de los elementos no eran precisos, no se sabía de la existencia de isótopos y se ignoraba la composición del átomo.

La necesidad de poner orden fue tal que en una misma década aparecieron hasta seis propuestas de clasificación. Tiene mucho encanto la clasificación musical del inglés Newlands: los elementos se repiten cada octava, como las notas musicales. El mismo Pitágoras renacía: siete planetas, siete colores, siete notas y... siete elementos. Cada elemento era una nota musical que se repetía.

La tabla de Newland era un claro anticipo de la más documentada de Mendeléiev. Cuando se descubrieron los gases nobles desapareció la magia del siete. No hay octava musical: hay octeto, un elemento busca su óptimo de energía en el gas noble.

La *Tabla periódica* produjo de inmediato sus primeros frutos: predice que los huecos que quedan se van a ir rellenando uno tras otros. La naturaleza cumple leyes matemáticas y los elementos se van sometiendo a dichas leyes.

El mecanismo es simple, según la posición de la tabla así serán las propiedades: cada columna tiene propiedades químicas similares. Mendeléiev tuvo la osadía de saltarse el orden de los pesos, pues no será hasta el siglo XX que se ordenen los elementos no por su masa sino por el número de electrones y protones.

La magia de la *Tabla periódica* reside en su concepción matemática. Con ella, el mundo de la química resulta ordenado y es comprensible. La naturaleza desvela otro de sus misterios. Misterios a los que Albert Einstein denominaba *los secretos del viejo*, los secretos de nuestro Universo.

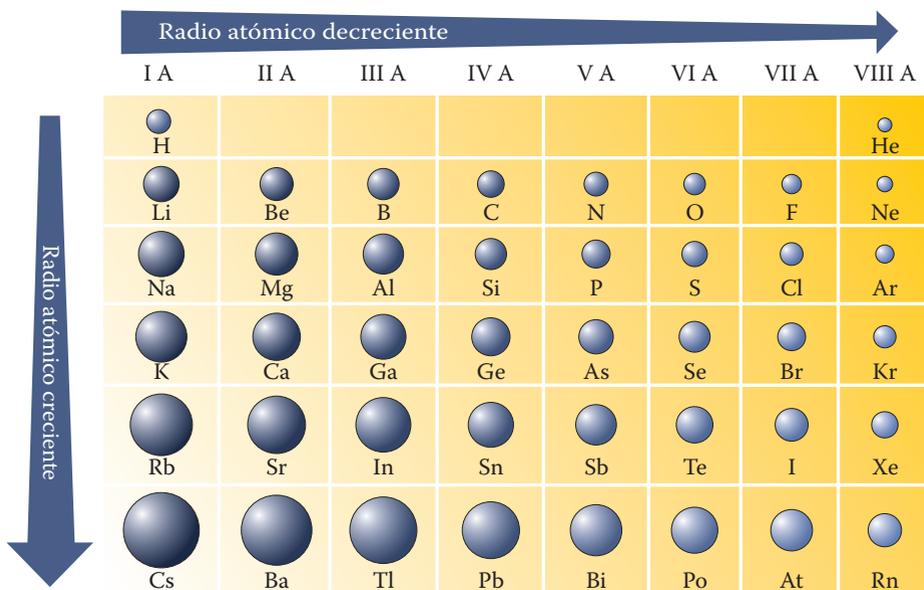


Sello español de correos dedicado a la tabla periódica de los elementos de Mendeléiev



El tamaño del átomo como indicador de las propiedades químicas

La medida del radio atómico es el indicador más visual de la tabla periódica, y su confirmación.



Radio atómico de ciertos elementos según su posición en la tabla periódica

Los gases nobles, columna VIII A, tienen el menor radio: retienen más cerca del núcleo todos sus electrones y apenas se combinan, son estables.

En cambio, los alcalinos, columna I A, son los metales más fuertes, el último electrón de estos elementos está muy alejado, tenderán a perderlo y por ello tienen el mayor radio. Mientras los halógenos, columna VII A, retienen sus electrones y tenderán a ganar un electrón para conseguir un radio mínimo.

Un elemento será tanto más metal cuánto más abajo y a la izquierda se encuentre y más metaloide cuánto más arriba y a la derecha. El hidrógeno juega doble papel y se puede considerar que o le sobra un electrón o le falta.



El átomo: el mundo se hace pitagórico

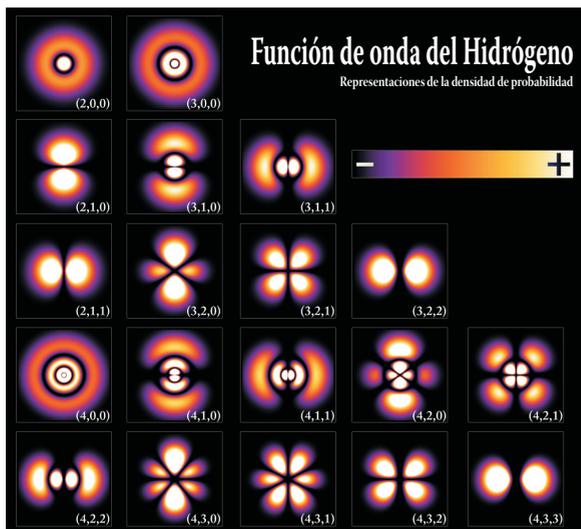
La tabla periódica de los elementos nos mostraba la tendencia de los elementos químicos a tener propiedades similares a otros. La tabla se limita a ponerlas de manifiesto. La explicación todavía no fue posible en el siglo XIX. Muchas cosas tuvieron que pasar. Las teorías clásicas fueron reemplazadas por una nueva física muy extraña: la mecánica cuántica.

A partir del descubrimiento de la radiactividad (Becquerel, 1896) todo empezó a tambalearse. El átomo dejaba de ser indivisible: Thomson descubre el electrón en 1897.

Plank cuantifica la radiación en 1900. Einstein recupera la teoría corpuscular de la luz en 1905. Bohr encuentra en 1914 la explicación a las líneas espectrales: los electrones no pueden estar en cualquier sitio, sus órbitas están cuantificadas. La música pitagórica empieza a sonar con fuerza. La realidad física depende cada vez más de los ojos matemáticos y menos de los sentidos, y sus leyes siguen números enteros.

En 1925 Werner Heisenberg trabajando con matrices hace la primera formulación de la Mecánica Cuántica. Un año más tarde Erwin Schrödinger formula la *mecánica ondulatoria*. El artículo de Schrödinger lleva el significativo título de “La cuantización como problema de autovalores”, difícilmente se puede decir mejor: El físico austriaco reducía la química atómica a un problema matemático.

En 1900 Hilbert en el Congreso de Internacional de Matemáticos de París planteaba su lista de problemas relevantes: el sexto era la fundamentación matemática de la Física. Su discípulo John von Neumann publica en 1932 los resultados de seis años de trabajo en un libro con título tan explícito como *Fundamentos matemáticos de la mecánica cuántica*. Von Neumann unificó las dos versiones, la matricial y la ondulatoria: las funciones de onda y las matrices forman dos espacios de Hilbert isomorfos.

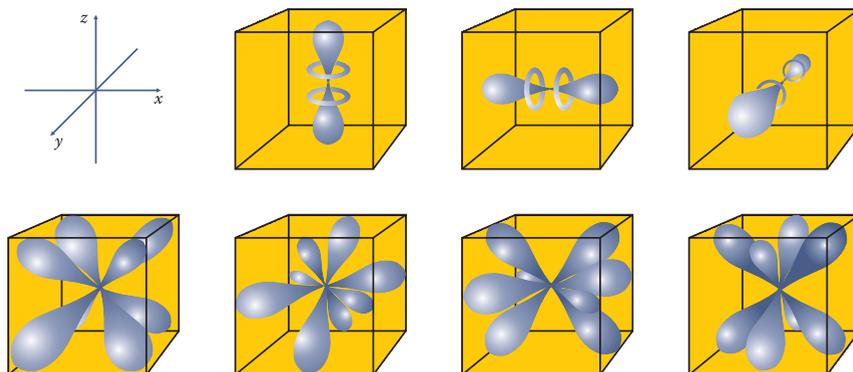


Representación gráfica de la función de onda del hidrógeno



Los electrones no pueden ocupar cualquier lugar, sus localizaciones están cuantificadas pero no en órbitas sino en regiones de formas de gran simetría a las que Millikan llamó orbitales y que Schrödinger había definido con más propiedad como *autofunciones* de cada *autovalor*.

La tabla periódica quedó explicada, los electrones del átomo tienen lugares con máxima probabilidad de ser localizados. Sus propiedades químicas dependen de la resolución de una ecuación matemática tan compleja que solo se puede abordar con simplificaciones o, en nuestros días, numéricamente.



Orbitales del hidrógeno en representación tridimensional

¿Qué ocurre si dos átomos se acercan? Sus electrones más externos determinarán si se unen en moléculas formándose autofunciones-orbitales moleculares: principios matemáticos sencillos y difícil solución numérica. Por fortuna la simetría nos resolverá muchas dificultades: un mundo de formas regulares.

Marie Curie como modelo

Si al azar preguntamos por el nombre de un científico, la respuesta más frecuente es Einstein, pero si preguntamos por una científica aparece ineludible el nombre de Madame Curie, con sus dos premios Nobel: 1903 en Física y 1911 en Química.

Marja Skłodowska nació en Varsovia en 1867, cuando Polonia estaba sometida a Rusia. Su padre y su abuelo fueron profesores de matemáticas en el liceo. A los 21 años se trasladó a París para continuar estudios en la Facultad de Matemáticas y Ciencias Naturales de la Sorbona.

En 1893 se licencia en Física y en 1894 en Matemáticas. Un año más tarde se casa con el profesor de física Pierre Curie. A continuación empieza el doctorado. Sólo una mujer –Elsa Neumann en Berlín– se había doctorado hasta ese momento en el mundo. Marie sería la primera en París.



Curie fue la primera profesora y la primera catedrática de Física en la Sorbona, al fallecer su marido en 1906. También fue la primera mujer enterrada en el Panteón de París y la primera en obtener el Nobel y la única con dos. Su imagen solitaria aparece en todo su esplendor en las reuniones de científicos que patrocinaba Solvay, en las que ella era la única mujer.

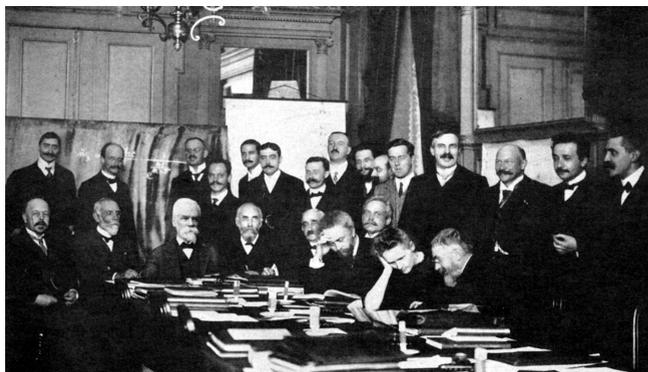
La tesis doctoral de Marie Curie estaba dedicada a estudiar la radioactividad de las sales de uranio. Durante su realización descubre dos nuevos elementos para añadir a la tabla de Mendeléiev: el polonio y el radio.

Por otra parte, Curie fue una mujer tímida y amable pero con la energía suficiente para ser rebelde, tanto en la ciencia como en lo social: científica y librepensadora educó a sus hijas con el mismo espíritu. Una de ellas, Irène Joliot-Curie, fue también Premio Nobel y formó parte de la Resistencia Francesa, durante la II Guerra Mundial.

Para hacernos una idea de las dificultades del trabajo de Curie tengamos en cuenta que la proporción de radio en los residuos de las sales de uranio era muy pequeña: obtuvo un gramo de cloruro de radio de ocho toneladas de residuos de pechblenda. En cantidades tan minúsculas los porcentajes no son el mejor sistema para expresar el contenido, ni siquiera las partes por mil, tendríamos que superar las partes por millón.



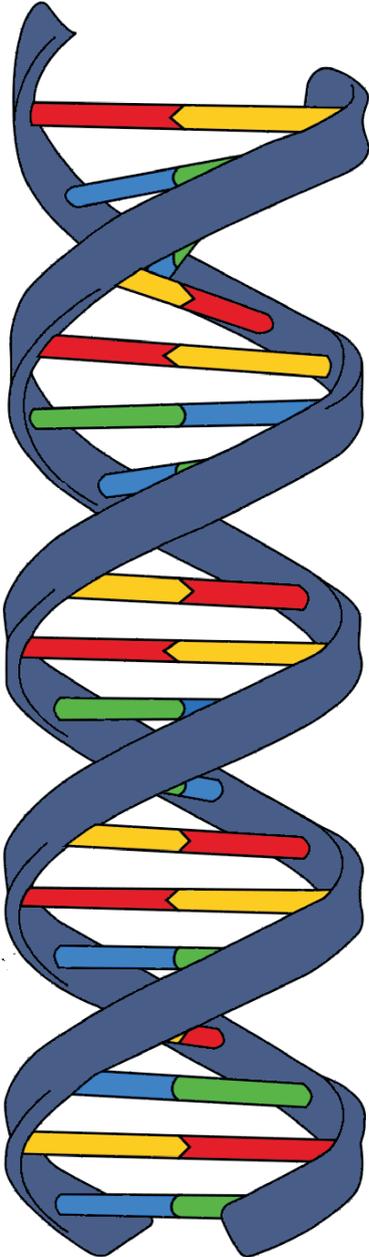
*Marja Skłodowska o Marie Curie
(1867-1934)*



Marie Curie hablando con Henri Poincaré, bajo la atenta mirada de Einstein, durante la Conferencia Solvay en 1911 (izquierda) y en su laboratorio (derecha).



La química de la vida usa la base cuatro



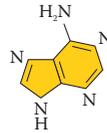
Hace poco más de medio siglo que se descubrió la estructura de doble hélice del ADN y menos de una década que se culminó el mapa del genoma humano, la base de la herencia. Conocemos su código, pero nos falta mucho para saber interpretarlo.

El genoma humano contiene más de 3000 millones de pares de bases, que vienen a ser las letras del código de la vida.

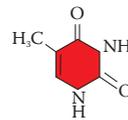
Los caracteres son sólo cuatro: *adenina*, *timina*, *citocina* y *guanina*.

A

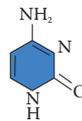
Adenina

**T**

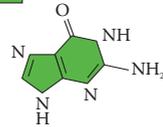
Timina

**C**

Citocina

**G**

Guanina



La información que albergan los genes es enorme, pero en el mundo de la informática estaríamos hablando del contenido de un disco duro de alrededor de un gigabyte.

La interpretación de cada secuencia de las letras es una tarea apasionante. Queda información de pasados evolutivos sin aparente uso, otros tramos son repetitivos, y algunas secuencias eran llamadas basura para después concluir que no lo eran tanto. El siguiente gran reto es el cerebro, lo que si sabemos es que usaremos matemática para conocer donde reside la matemática.

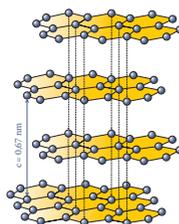
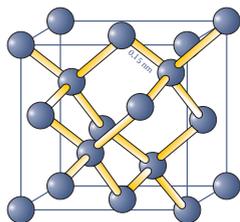
*Doble hélice del ADN,
con los pares de bases en su código de colores*



Duro o blando, es geometría

El carbono se encuentra en la naturaleza en distintas formas; nos fijaremos en dos extremas por su dureza: el blando grafito y el durísimo diamante. ¿Dónde radica la diferencia? ¿Qué cambia el color y hace al diamante el material natural más duro que se conoce? Respuesta: la geometría interna.

El carbono está situado en la tabla a cuatro posiciones de los gases nobles. Tiene cuatro electrones disponibles para enlazar y compartir. Su forma de hibridación óptima es situarse en el centro de un tetraedro regular. Todo es geometría y simetría.



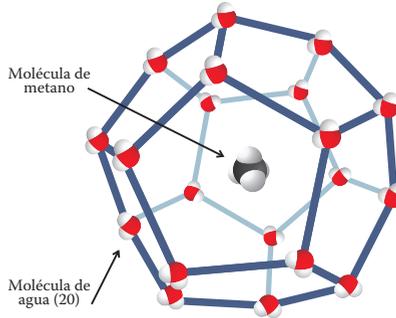
Diamante y grafito en sus formas cristalinas y su correspondiente estructura interna

En el diamante los átomos de carbono forman una redícula cúbica fuertemente ensamblada, es regular e impenetrable. Su regularidad deja huecos y pasa la luz. Por el contrario en el grafito la presión ha situado los átomos en capas hexagonales que deslizan unas sobre otras, haciéndolo blando y usable como mina de lápices. La luz no lo atraviesa.



Un mundo de sólidos platónicos y poliedros

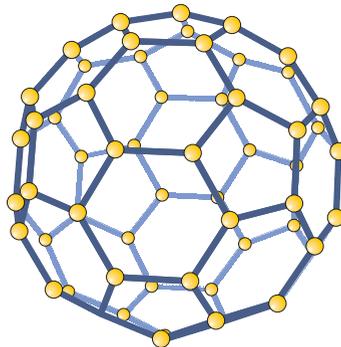
Los sólidos platónicos vuelven a encontrarse en la estructura interna de la materia. En este caso por partida doble. El metano, CH_4 , tiene forma de tetraedro con el baricentro en el átomo de carbono, y su hidrato es un dodecaedro con el metano en su baricentro.



Una molécula de metano, en el centro, se combina con 20 moléculas de agua, dispuestas en los vértices de un dodecaedro, formando una estructura cristalina similar al hielo

Hoy se estudia el hidrato de metano como alternativa energética a los otros hidrocarburos. La belleza de la estructura no puede dejar de admirarse: la naturaleza ama la geometría.

En 1985 se descubrió la tercera forma más estable del carbono, los fulerenos. Si el diamante y el grafito tienen múltiples aplicaciones no van a ser menos las de sus hermanos de laboratorio, los fulerenos: microrrecipientes y nanotubos. El C_{60} , con sus 60 átomos en los sesenta vértices de un icosaedro regular truncado, es el recipiente más pequeño y estable que se conoce, en su interior podemos hacer transportes atómicos.

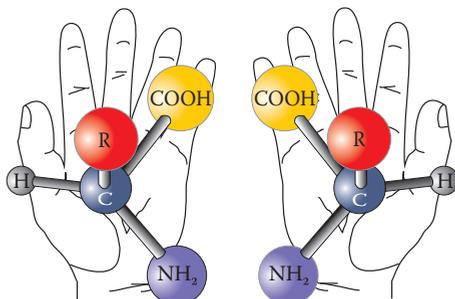


Fulereo. 60 átomos de carbono se disponen formando un icosaedro truncado, similar a un balón de fútbol



Isómeros ópticos

Una bella propiedad que tienen algunos compuestos es la *isomería*: la misma composición, la misma fórmula, puede tener distintas propiedades. En la química orgánica (la química del carbono) esto es muy frecuente.



La mano izquierda y la derecha son simétricas pero no superponibles en el espacio tridimensional, como muchos isómeros orgánicos

Una muestra muy espectacular es la isomería óptica. Las moléculas orgánicas son espaciales pues se forman uniendo tetraedros donde el carbono ocupa el centro de gravedad. En la más sencilla, el metano CH_4 , los vértices del tetraedro son los cuatro átomos de hidrógeno. El metano tiene todas las simetrías del tetraedro. Si cada vértice contiene un átomo (o radical) distinto se pueden dar dos situaciones: los compuestos son el mismo pero con simetría especular, como nuestras manos. Derecha e izquierda no son superponibles. Pasteur, el descubridor del origen microbiológico de las enfermedades, observó esta propiedad viendo como la luz en el ácido tartárico se desviaba unas veces hacia un lado y otras al otro.



Isómeros ópticos

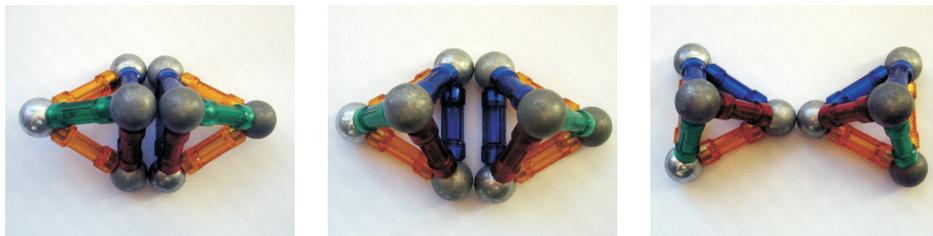
Una visión geométrica del enlace

El carbono se encuentra en la columna *IV A*, como el silicio, por ello le faltan cuatro electrones para alcanzar su mínima energía. Como necesita ganar cuatro compartiendo cuatro, la disposición espacial es la de un tetraedro. El carbono domina el mundo orgánico y el silicio el mundo mineral de la corteza terrestre, no debemos extrañarnos de que los tetraedros microscópicos nos asedien.



El vidrio de las ventanas se hace con sílice. Por ello, si aplicamos nuestro microscopio matemático, veríamos multitud de tetraedros ensamblados unos con otros desordenadamente pues el vidrio no es un cristal (aunque en castellano se le llame al vidrio *crystal*) sino un líquido subenfriado con estructura amorfa.

Con los tetraedros podemos entender mejor qué es un enlace triple (unidos por una cara), doble (unidos por una arista) y sencillo (unidos por un vértice).



Representación esquemática de los enlaces triple, doble y simple del carbono

La notación científica: el número de Avogadro

En 1811, el italiano Amadeo Avogadro propuso que el volumen de un gas en condiciones dadas de presión y temperatura es directamente proporcional al número de sus átomos o moléculas. Avogadro pudo formular la ley, pero no estaba en condiciones de decir cuál era el tamaño del átomo y por tanto cuántos había en una unidad de volumen. Para calcular una primera aproximación hubo que esperar más de cincuenta años.



Fue el químico francés Jean Perrin –ya en el siglo XX– quien propuso que la medida precisa del número de moléculas de un mol reciba el nombre de *número de Avogadro*.

El *número de Avogadro*, N_A , es aproximadamente $6,022 \times 10^{23}$ y quizá sea el primer número en notación científica que usan los estudiante.

Se puede eludir el uso de la notación científica definiendo unidades muy grandes o muy pequeñas, según necesidades como el año luz, el picofaradio o el angstrom. Pero para las constantes físicas universales, con el *número de Avogadro*, al ser catidades y no magnitudes, hay que usar la notación científica. Hoy ésta resulta imprescindible para la comprensión del micromundo y el macromundo.

El problema clásico de números grandes, que recuerda mucho al de Avogadro, es el que plantea Arquímedes en *El arenario*: el número de granos de arena que hay en el mundo no es infinito, se puede calcular y expresar matemáticamente. La notación científica ofrece una solución elegante a la cuestión.



Actividades para celebrar el Día escolar de las matemáticas

El cuadernillo que tienes en tus manos está dibujado con pinceladas de trazo grueso. Son reflexiones sobre algunas cuestiones de la presencia matemática en la química. No pretende ser exhaustivo, dada la imposibilidad de abarcar una ciencia madura tan desarrollada como la química. Busca sólo iluminar algunos aspectos que, por su interés histórico, por su belleza o por su capacidad de sugestión, nos han parecido interesantes.

En la página de la Federación en internet www.fespm.es puedes encontrar propuestas de actividades para realizar en clase para distintas etapas educativas para relacionar las matemáticas con la química y viceversa.

Algunos recursos útiles

Como apoyo de las actividades recomendamos:

- la película *Madame Curie* (1943), de Mervyn LeRoy
- el documental *Potencias de diez* (1977), de Charles y Ray Eames
- el homenaje a *Potencias de diez* de los Simpson en el episodio 8º de la 15ª temporada, titulado *Artie Ziff viene a cenar* (2004).
- el libro *El tío Tungsteno: recuerdos de un químico precoz*, de Oliver Sacks, Anagrama (2003).

La estructura molecular es pura geométrica, dispongámonos a trabajar con todo tipo de materiales: palitos, plastilina, *geomag*, recortables... Hagamos visible el micromundo mediante su modelización. De todo encontrarás en las actividades.

Algunas actividades en www.fespm.es

- Experimento crucial de Proust
- Simetría en el plano y en el espacio
- Mundo molecular, mundo de poliedros
- Enlace químico
- Notación científica y logaritmos
- Ver crecer un fractal usando la química
- El carbono 14 y la datación histórica
- La base 2 del ordenador, la 4 de la vida y la 10 de nuestras manos



Federación
Española de
Sociedades de
Profesores de
Matemáticas

Servicio de publicaciones
Apartado de Correos 590
E-06080 Badajoz
www.fespm.es
publicafespm@wanadoo.es

*Las matemáticas de la
química*

Ángel Requena © 2010

Diseño y maquetación FMC
Imprime TECNIGRAF, S.A., Badajoz

Emisión espectrográfica del hierro