

Manuel R. Bermejo Patiño
Departamento de Química Inorgánica
Universidade de Santiago de Compostela

AS MATEMÁTICAS NA MIÑA QUÍMICA

1. Introducción

É un pracer para cantos vivimos por e para a Educación falarlle a educandos e a futuros educadores do que é unha das túas pasións na vida.

É tamén practero descubrirlle, á xente nova, para que sirva aquilo no que se están a formar. Moitas veces tiven que animar ós meus alumnos de terceiro ciclo insuflándolles confianza no que sabían para que non tiveran "*medo o medo*" de fracasar no laboratorio; hoxe podo facer outro tanto por alumnos dunha outra titulación. Hai momentos nos que compre eleva-la autoestima dos alumnos para que cheguen a descubrir canto saben e canto son capaces de facer, se confían neles mesmos.

Por estas razóns, e porque a misión do profesor é adeprender ós alumnos a aprender, estou aquí para contarvos de que me sirven as matemáticas na miña química.

Non se trata de que vos descubra a importancia histórica das matemáticas, nin siquiera dos matemáticos que foron facendo a historia, nin de como os matemáticos están, hoxe, a se comportar como asesores de grandes empresas, nin Non. De moitos destes aspectos, e de outros, falarase neste curso que, por sorte, eu inicio.

Eu quero contarvos como uso as matemáticas.

2. A Química Ciencia Precisa

Para chegar a contarvos como uso as matemáticas na miña química cumpriría que indicara se a química necesita das matemáticas. A pregunta semella retórica, dado que, hoxe, tódalas ciencias experimentais e mesmo as formais (sociais, psicoloxía, economía, socioloxía, pedagogía... etc.) considéranse deudoras das matemáticas. Máis isto non foi sempre así na historia da humanidade.

A miña disciplina, a Química, utilizou a matemática, dun xeito consciente ou inconsciente dende o principio dos tempos; pero non foi ata que utilizou o concepto de precisión que foi quen de se transformar nunha Ciencia Moderna.

Dende a remota antigüidade os humanos practicamos a química: na metalurxia, na cosmética, na agricultura, na alimentación...; pero non era unha ciencia no sentido moderno do término. Na época da Alquimia, da Iatroquímica... etc. seguíanse facéndose experimentos e prácticas no laboratorio químico pero aínda non era Ciencia. Cando a Química se fai precisa: aprende a pesar (utiliza a balanza); reproduce as medidas e os experimentos; introduce e usa o concepto de error; ... crea unha linguaxe precisa, fácil e recoñecible por todos cantos a practican;... etc. Nese momento está a nacer como Ciencia Moderna e está usando conceptos matemáticos para poderen ser precisa.

Nótese a diferenza entre Ciencia precisa e Ciencia exacta. As matemáticas son unha ciencia exacta; a Química non; pero sí é precisa. Un mol de sal (NaCl) son 58.5 g. pero cando preparamos unha disolución 1 molar pesamos con precisión (aproximadamente uns 58.5 g); pero non con exactitude. Na química non necesitamos saber con exactitude a entalpia dunha reacción; necesitamos precisar a súa magnitude. A entalpia dunha reacción exotérmica poder ser sobre 200 Kjulios; pero temos información dabondo con que se nos diga que é 190 ou 210 Kjulios.

A Química é deudora das Matemáticas como instrumento de medida; pero tamén como fundamento teórico para o desenvolvemento de toda a nosa Ciencia.

3. As Matemáticas que usa un químico experimental

Semella claro que os químicos teóricos están a utilizar, dun xeito permanente, as matemáticas para o desenvolvemento das súas teorías e a implementación e mellora dos novos tratamentos informáticos para o procesado da información científica; pero, que sucede cun químico experimental?

Eu son un deses químicos experimentais. Dos que sintetizan novos compostos que poden ter interese farmacéutico, tecnolóxico, industrial....

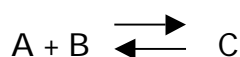
Todo canto facemos no laboratorio depende, consciente ou inconscientemente das matemáticas. Compre preparar disolucións para todo (facer unha reacción, medir propiedades físicas ou química, estudar a velocidade dunha reacción... etc.) todo escomenza por pesar unha cantidade dun composto, obtida partindo da utilización dunha ecuación matemática perfectamente coñecida: se fai dun xeito inconsciente; pero se aplica sistemáticamente as matemáticas.

Cando se obtén un composto compre caracterizalo e se fai pola súa análise elemental (datos experimentais que se axustan a unha fórmula empírica). Si obtemos cristais compre estudar a súa estrutura cristalina por medio da difracción dos raios X (DRX): Esta técnica nace do estudio realizado pola Bragg sobre a difracción que sofren os raios X cando se atopan, nunha rede cristalina, cun átomo, ión ou agregado. A fórmula matemática que da conta da difracción é $2d \sin \theta = n\lambda$. Deste xeito se pode coñecer a posición relativa dos átomos nunha rede. Hoxe, a utilización da informática nos permite que o plotter dunha impresora nos represente cal é a estrutura do noso composto e como está ubicado, cada agregado, na celda elemental.

Canto veño de contar con esta técnica acontece con toda a batería de técnicas experimentais que hoxe temos para estudar o comportamento dos compostos que preparamos.

Estou a falar do final do proceso experimental que leva á obtención dun novo composto químico; pero, como se fai para deseñar un experimento?

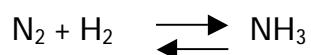
Compre realizar unha xeira de etapas teóricas denantes do deseño do experimento. Hoxe compre optimiza-los recursos e non contamina-lo ambiente con produtos que poden ser tóxicos; por todo elo compre estudar, teóricamente, se ese composto se poderá ou non formar. Primeiramente debemos estudar se a entalpia de formación do composto é favorable ou non (existen unha xeira de expresións matemáticas, para cada tipo de composto, que os químicos sabemos empregar para coñece-la posible estabilidade termodinámica dun composto). Claro que non abonda con coñecer ΔH_f , pois o composto vaise obter nunha reacción química



e a ΔH_f non é o factor determinante, as veces. A reacción ven gobernada pola Enerxía libre de Gibbs; de modo que: $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$

Seguimos a introducir ecuacións matemáticas cun definido sentido químico; pero que nos permitirán facer prediccións sobre a viabilidade dos procesos.

Si o composto é termodinamicamente estable, estamos a dicir que se pode preparar; máis compre que se poda preparar no menor tempo posible. De nada serviría tratar de preparar un composto que tardaramos anos en obtelo porque a cinética da reacción fose lenta. Como exemplo a reacción de obtención do amoníaco



A entalpia de formación do NH_3 é favorable, na reacción de obtención a ΔG , é tamén favorable; pero si, nos, poñemos xuntos o gas dinitróxeno (N_2) e o gas dihidróxeno (H_2) nada sucede: Logo a reacción non se pode realizar así. Compre estudar a súa cinética.

A cinética dun proceso defínese polo tipo de orde de reacción que a representa e pola súa velocidade: obviamente a velocidade defínese matemáticamente por unha derivada.

$$V = \frac{d [\text{NH}_3]}{dt}$$

e tamén se pode representar por outra expresión matemática que relaciona as concentracións dos produtos que interveñen na reacción $[\text{N}_2]$ e $[\text{H}_2]$ e unha constante K

$$V = K [\text{N}_2]^x [\text{H}_2]^y$$

Esta constante non é en realidade constante, senón un operador matemático que correlaciona unha serie de factores característicos dunha determinada reacción.

$$K = A \cdot e^{\frac{-E_a}{KT}}$$

Non seguirei explicando que representa cada un dos factores que definen a chamada constante de velocidade; pero, vos decatades de cómo a matemática está no fondo de canto fai un químico no laboratorio?

Certo que todas estas expresións matemáticas non son nada inventado senón o resultado da experimentación no laboratorio explicitado en forma de leises que servirán

para elabora-las desemeillantes teorías que dan conta da cinética dos procesos químicos; pero as matemáticas impregnan a nosa química.

Tamén é certo que, os químicos experimentais, utilizamos estas expresións matemáticas dun xeito automático: como quen sabe que o se erguer da cama ten que limpa-los dentes usando a pasta, o cepillo e uns movementos automáticos, e o fai sen se decatarse.

Así acontece as máis das veces coa utilización que fai un químico experimental das matemáticas. Máis as matemáticas impregnan o seu quefacer.

4. As Matemáticas na miña aula

Non pretendo cansar en demasía ós que estades lendo estas notas; máis quero amosarvos tan só parte dunha das miñas clases: a que fai referencia a como se lles conta ós alumnos, do primeiro ano, o mundo do átomo e os electróns.

Para falar dos electróns e comprendermos onde e como se colocan ó redor do núcleo compre definir como é o electrón, ou como se representa nun modelo atómico: o electrón é coma si se tratara dunha partícula con masa que leva asociada unha onda.

De Broglie definiu ó electrón por medio dunha relación, matemática obviamente, entre a cantidade de movemento (p) que leva a partícula e a lonxitude de onda (λ) que a acompaña de modo que:

$$\lambda = h/p \quad \text{nace a mecánica-cuántica.}$$

Máis si o electrón é moi cativo e eu quero velo cun microscopio suficientemente potente _necesito un microscopio cunha lonxitude de onda da orde do angstrom_ esta iluminación afectará á onda que acompaña á partícula, desprazando a posición

da onda, polo que, segundo Heisemberg, teremos unha incerteza na fixación da súa posición, esto é:

$$\Delta p \Delta x \geq h/4$$

Seguides a "onda" de como se explica a química?

Claro que, agora, si o electrón se comporta coma unha onda eu poderei definilo, matematicamente claro, pola súa ecuación de ondas; de modo que se relacione a enerxía da partícula coa función da onda que o caracteriza:

$$H \psi = E \psi$$

onde ψ é a función da onda asociada coa partícula e E as enerxías que terá esa partícula asegún sexa o operador (H) que define esa relación.

O operador de Hamilton "H" é quen explicita a relación entre a función da onda propia de cada electrón e os valores das enerxías que pode alcanzar dentro de cada unha das posicións que o electrón pode ter no modelo atómico.

Poderíamos seguir, pero non é o caso, amosando como aparecen, matematicamente, os números cuánticos: n, l, m . Que significado físico teñen eses números cuánticos e, finalmente, como podemos comprender e explicita-lo modelo atómico.

Consciente ou inconscientemente, ¿non hai moita matemática nas clases de química?. ¿Non estamos a empregar, permanentemente, expresións matemáticas para explicitar os conceptos químicos?.

5. A Interdisciplinaridade nas Ciencias

¡Mágoa que non teñades estudiado nada de Física e de Química na vosa carreira!. Esta miña lección non sería precisa pois sería innecesaria e non vos serviría de nada; máis agora que cheguei ó remate da miña exposición si que comprendo can necesaria vos é, ó non ter escoitado falar da química nunca.

Nos últimos tempos caminamos tanto cara á especialización que esquecimos, nos plans de estudos, a imprescindible interdisciplinaridade nas ciencias. ¿Cómo se pode estudar matemática aplicada, modelos matemáticos, ... etc. sen coñecer, nada, das outras ciencias?. ¿Cómo se pode seguir a explica-las matemáticas do bacharelato sen lle poder contar ós vosos alumnos para que sirven, como facelas útiles?. ¿Cómo integrarse en equipos de investigación, dos institutos modernos, sen coñecer cal é a linguaxe das outras ciencias?.

Cando eu era novo esta relación era moi común: os matemáticos estudiaban algo de ciencias, de modo que a nosa linguaxe non lles era completamente extrana. Deste xeito podíamos facer moitos traballos en común, coma os seguimos hoxe a facer no mundo interdisciplinar da experimentalidade.

Remato xa presentándovos como lle adeprendo ós meus alumnos de investigación a resolver os seus problemas; seguro que tamén vos poderá ser de utilidade. Cando teñades un problema de investigación duro seguides o camiño seguinte:

1º Prantexar varias preguntas pertinentes sobre como resolvelo. A verdadeira resposta será a correspondiente á pregunta mellor prantexada sobre o problema.

2º Se non atopades a resposta, por non ser quen de prantexar ben as preguntas, buscade outros colegas de ciencias que vos escoiten o problema. Metédeos no voso problema, obrigádelles a escoitar e resolver, de novo, as preguntas por vos pensadas; que as critiquen, que prantexen novas preguntas, seguro que teredes máis éxito.

E remato xa. Non vín coa intención de ensinarvos nada novo. En todo caso tentei contarvos como se pode aprender ciencia, por elo votei man de tantas preguntas. Sei de certo que entre tantas preguntas como vos prantexei algunha vos poderá servir para que, cada quen, atope a súa resposta.

Santiago Marzo 2004