

COLEGIO "ALEJANDRO GUILLOT"

CLAVE 1298



QUÍMICA – MATEMÁTICA, UNA RELACIÓN NECESARIA

CLAVE DE REGISTRO DEL PROYECTO: CIN2015A50011

ÁREA DE CONOCIMIENTO: ÁREAS DE CONVERGENCIA

DISCIPLINA: MATEMÁTICAS

DISCIPLINAS DE APOYO: QUÍMICA

TIPO DE INVESTIGACIÓN: DOCUMENTAL

AUTORES:

JOANA LANDA COVARRUBIAS

KARLA MIRANDA MANRIQUE

ASESORES:

PROFESORA ULISES CARACCIOLI OCHOA

PROFESORA XOCHITL EQUIHUA PÉREZ

MÉXICO, DISTRITO FEDERAL

ENERO 2015

RESUMEN

Palabras Clave: Matemáticas, Química, isomería, geometría.

Es un hecho indiscutible que las matemáticas son necesarias para la química.

La química indudablemente usa a las matemáticas continuamente, las utiliza en cualquiera de sus cuatro áreas más importantes, las cuales son: analítica, física, inorgánica y orgánica; en ellas son utilizadas para lograr hacer cálculos de estequiometría, rendimientos, despejar alguna incógnita, etc.

Por otro lado, la química es una ciencia madura capaz de obtener prácticamente todo lo que se propone; la química puede aportar mucho para el futuro y bienestar de la humanidad.

La interacción entre la química y las matemáticas está creando un área científica muy importante, ya que, juntas están adquiriendo una gran relevancia científica. Otros beneficios de esta relación podría ser que la química podrá ser capaz de explicar mejor los resultados experimentales y tendrá mayor capacidad de predicción de las propiedades de las moléculas y de los materiales que con ellas se fabriquen.

La química matemática es el área de la química encargada a las aplicaciones de las matemáticas en la química y se ocupa principalmente de los modelos matemáticos de los fenómenos químicos.

En ésta investigación, pretendemos mostrar la relación sinérgica que existe entre las matemáticas y la química la cual va más allá de la utilización de simples operaciones matemáticas.

La química tiene muchas ramas y pretendemos mostrar como las matemáticas están presentes en todas ellas y sin lugar a dudas podremos ver que entre la química y las matemáticas existe una armoniosa relación necesaria.

ABSTRACT

Keywords: Chemistry, mathematics, geometry, isomerism.

It is an indisputable fact that mathematics is necessary for chemistry. Chemistry undoubtedly use mathematics continuously, use them in any of its four most important areas, which are: analytical, physical, inorganic and organic; they are used to make calculations of stoichiometry, yields, clear any unknown, etc.

On the other hand, chemistry is a mature science able to obtain practically everything what is proposed; Chemistry can contribute much to the future and well-being of mankind.

The interaction between chemistry and mathematics are creating a very important scientific area, and which together are acquiring a scientific relevance. Other benefits of this relationship may be that the chemical may be able to better explain the experimental results and have greater predictability of the properties of molecules and materials which are produced with them.

The mathematical chemistry is the chemistry area responsible applications of mathematics in chemistry and mainly deals with mathematical modeling of chemical phenomena. In this research, we intend to show the synergistic relationship between mathematics and chemistry which goes beyond the use of simple mathematical operations.

The chemical has many branches and we intend to show how mathematics is present in all of them and undoubtedly will see between chemistry and mathematics required a harmonious relationship

INTRODUCCIÓN

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

¿Cómo podremos demostrar la relación sinérgica que existe entre las matemáticas y la química?, ¿cómo demostrar que ésta relación va más allá de la utilización de simples operaciones matemáticas?

HIPÓTESIS

Si se construye un modelo geométrico de una molécula orgánica con las dimensiones reportadas en la investigación, entonces se podrá comprobar la interrelación de las matemáticas con la química en el aspecto de estructura molecular, diseño en tres dimensiones y comportamiento químico de una sustancia determinada.

JUSTIFICACIÓN

La presencia de las distintas ramas de las matemáticas en la química es innegable; la geometría, la aritmética, el álgebra nos permite introducirnos con paso seguro en el mundo de la ciencia.

Las matemáticas expresan fórmulas, teoremas y leyes de la química, siendo una herramienta para trabajar con la química, con la presente investigación queremos mostrar que esta sinergia va más allá de cálculos matemáticos.

SÍNTESIS O CONJETURAS

Es un hecho indiscutible que las matemáticas son necesarias para la química.

La química indudablemente usa a las matemáticas continuamente, las utiliza en cualquiera de sus cuatro áreas más importantes, las cuales son: analítica, física, inorgánica y orgánica; en ellas son utilizadas para lograr hacer cálculos de estequiometría, rendimientos, despejar alguna incógnita, etc.

Por otro lado, la química es una ciencia madura capaz de obtener prácticamente todo lo que se propone; la química puede aportar mucho para el futuro y bienestar de la humanidad.

²La Química Matemática se refiere al relativamente nuevo campo de estudio dentro de la Química cuyos objetivos son el lograr y entender nuevas relaciones y aplicaciones de la Química y las Matemáticas haciendo uso de modelos, ecuaciones, y matemáticas aplicadas para el estudio de fenómenos químicos y fisicoquímicos

haciendo uso también de la computación como coadyuvante en los subcampos de la Química Matemática.

La interacción entre la química y las matemáticas está creando un área científica muy importante, ya que, juntas están adquiriendo una gran relevancia científica. Otros beneficios de esta relación podría ser que la química podrá ser capaz de explicar mejor los resultados experimentales y tendrá mayor capacidad de predicción de las propiedades de las moléculas y de los materiales que con ellas se fabriquen.

La química matemática es el área de la química encargada a las aplicaciones de las matemáticas en la química y se ocupa principalmente de los modelos matemáticos de los fenómenos químicos.

Algunos ejemplos son la Topología que estudia las estructuras moleculares de algunas sustancias químicas explicando las funciones de onda de los átomos que forman una molécula y cómo se ajustan en un conjunto de interacción mutua por medio de descripciones algebraicas.

La Química Cuántica, así mismo, estudia teorías donde se aplican la mecánica cuántica y la teoría cuántica de campos. Así mismo hace uso de física cuántica y el comportamiento físico de las moléculas y átomos como lo son la óptica, magnetismo, electricidad, y mecánica.

También se encuentran un par de teorías:

La Teoría de grafos que estudia las propiedades de las gráficas o grafos con ayuda de la computación y con aplicación de estudio en la estereoquímica (estereoisomería e isomería) en la que se profundiza acerca de las formas geométricas de las moléculas químicas.

Y la Teoría de grupos que estudia las estructuras algebraicas conocidas como grupos y se utiliza en situaciones caracterizadas por la simetría y como pilar para los espacios vectoriales.

Todos estos subcampos son áreas de estudio modernas en las que la Química Matemática funge como pilar al aportar técnicas y modelos matemáticos de alta especialización para resolver ecuaciones, comprobar teorías, así como del análisis de los procesos mismos de todo tipo de reacciones y estudios químicos.

Al ser fundamento y base para campos de estudio que están al servicio y dominio del ser humano se puede concluir que hay una relación necesaria y precisa entre las Matemáticas y la Química, dos ciencias que han estado íntimamente ligadas desde el principio de razonamiento científico en sí.

La química tiene muchas ramas y pretendemos mostrar como las matemáticas están presentes en todas ellas y sin lugar a dudas podremos ver que entre la química y las matemáticas existe una armoniosa relación necesaria.

OBJETIVO GENERAL

Comprobar que la interacción de la química con las matemáticas da un resultado aplicable en el diseño y construcción de modelos moleculares de un compuesto orgánico como son las grasas, a partir de modelos geométricos, empatando dichos parámetros con figuras tridimensionales ya existentes.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Realizar las mediciones a partir de las bibliográficas de una molécula de un compuesto orgánico predeterminado y construir un modelo en tres dimensiones de la misma.

Estudiar algún modelo ya existente y realizar su construcción en una estructura tridimensional para comprobar si sus características geométricas condicionan su comportamiento químico.

FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

Platón consideraba que las partículas de cada elemento tenían una forma geométrica determinada.

El primer intento de relacionar la química con las matemáticas fue por Alexander Crum Brown representando en un artículo:

- Compuesto químico = operandos
- Procesos químicos = operadores

Otro científico involucrado en este proceso fue Arthur Cayley quien desarrolló las matrices que ahora son esenciales en los avances de la química cuántica. En un artículo acuñó el término:

- Nature =chemicograph = grafo

La química matemática es el área científica que se encarga de estudiar las aplicaciones de las matemáticas en la química, empleando bases matemáticas para modelar los procesos químicos.

Algunos de los procedimientos que vinculan las matemáticas con la química en la modelación de un proceso son los siguientes:

- Elegir un conjunto de compuestos.
- Expresarlos matemáticamente.
- Medir los parámetros matemáticos que mejor definan la estructura molecular.
- Enlazar ambos parámetros en un modelo matemático o geométrico.
- Analizar la relación entre parámetros.

Para poder calcular orbitales moleculares en este caso, se necesita un modelo y se debe tomar en cuenta que un “grapho” representa a los grupos químicos y las uniones entre ellos.

La interacción de la química con las matemáticas ha creado un área científica multidisciplinaria que construye las bases teóricas necesarias para establecer más eficazmente resultados aplicables y comprobables.

Aceites y grasas

Los aceites y grasas de los animales y plantas son mezclas que contienen ésteres de ácidos grasos y glicerol. El término grasa designa aquellas mezclas que son sólidas o semisólidas a temperatura ambiente, en tanto que aceite se aplica para mezclas líquidas.

Los ácidos grasos pueden ser saturados o no saturados y difieren en longitud de cadena (4 a 24 átomos de carbono) y en el número y posición de los dobles enlaces (insaturados).

Las grasas son compuestos en los que los ácidos grasos saturados predominan sobre los no saturados; los principales son laúrico, palmítico, y esteárico. Son de origen animal como mantequilla, manteca, etc.

Los aceites contienen fundamentalmente ácidos grasos no saturados, lo que ocasiona la disminución de los puntos de fusión; entre estos están el oleico, linoléico y linoleico. Todos contienen 18 átomos de carbono, pero difieren en su grado de insaturación.

- Ácido oleico o ácido 9-octadecenoico
- Ácido linoleico o ácido 9,12 octadecadienoico
- Ácido linoléico o ácido 9,12,15 octadecatrienoico

Los aceites son de origen vegetal como el de olivo, maíz, soya, semilla de uva, etc. Cuando se hidrogenan las dobles ligaduras de las moléculas de estos aceites (líquidos), el producto resultante es un sólido a temperatura ambiente. De la hidrogenación de los aceites de maíz, algodón, cacahuate y soya se obtiene la oleomargarina

Las propiedades de las grasas:

- Producen una mancha sobre papel
- Son insolubles en agua
- Son muy solubles en éter, acetona, tetracloruro de carbono, etc.
- Al hacer contacto con el aire adquieren un olor desagradable y se hacen rancias.

El efecto sobre el organismo de los diferentes tipos de grasas

- En nuestro cuerpo, se encuentran diferentes tipos de grasas, las cuales tienen efectos diferentes:
- De origen animal encontramos a los **ácidos grasos saturados**, así como el **colesterol**, de origen vegetal encontraremos a los **triglicéridos**.

Los ácidos grasos hidrogenados, mejor conocidos como **grasas trans**, son aquellos que han cambiado químicamente lo que causa un efecto diferente en el organismo.

Cuando el aceite líquido se transforma en una grasa sólida debido a la adición de hidrógenos (a lo que llamamos hidrogenación) esto sucede cuando la grasas es reutilizada y recalentada en varias ocasiones obteniendo así las **grasas trans** y sirven para aumentar el tiempo de la vida útil de los alimentos.

Este tipo de grasas se encuentran en pequeñas cantidades en la carne de cerdo y de cordero así como en la mantequilla y la leche. Alimentos procesados como la margarina, las galletas, papas fritas y otras botanas contienen este tipo de aceites vegetales y causan un aumento en el colesterol malo (LDL) y los triglicéridos. Gottau G. (2010).

Tipo de grasas	Efecto sobre el organismo	
	Colesterol malo (LDL)	Colesterol bueno (HDL)
Grasas saturadas	↑↑↑	↔
Monoinsaturadas	↓	↑
Poliinsaturadas	↓	↔
Grasas Trans	↑↑↑	↓
Colesterol	↑	↔

Grafica 1. Esta grafica nos deja ver que las grasas saturadas afectan directamente al colesterol LDL y el colesterol bueno es neutro.

- Cuando los ácidos grasos son monoinsaturados disminuyen el colesterol malo aumentando el HDL. (o colesterol bueno)
- Los **ácidos grasos poliinsaturados** tienen efecto neutro sobre el colesterol bueno pero reducen el colesterol LDL y las grasas trans, tienen un efecto más perjudicial aun que las grasas saturadas, ya que incrementan notablemente el colesterol malo y al mismo tiempo, reducen el colesterol bueno o cardiosaludable.
- De esto se desprende que debemos ingerir del total de **grasas** diarias, menos del 2% de grasas trans, menos del 7% de grasas saturadas, 10%

de ácidos grasos poliinsaturados y entre 13 y 15% de grasas monoinsaturadas como las que posee el aceite de oliva, por ejemplo.

METODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN

Se llevarán a cabo investigaciones bibliográficas y electrónicas sobre las medidas y formas que se pueden presentar en los lípidos, se reproducirán a través de modelos geométricos las estructuras de los mismos mediante cálculos matemáticos.

Se explicará como su forma geométrica puede influir en su comportamiento químico y cómo influyen en la salud.

RESULTADOS



Fig. 1

Formato de color terminado, El color azul representado moléculas de Hidrógeno, Color rojo moléculas de Carbono, y las grises moléculas de Oxígeno. Seaido de ir uniéndolas.



Fig. 2

Finalizando la unión de las moléculas, para dar la forma final a nuestro compuesto.

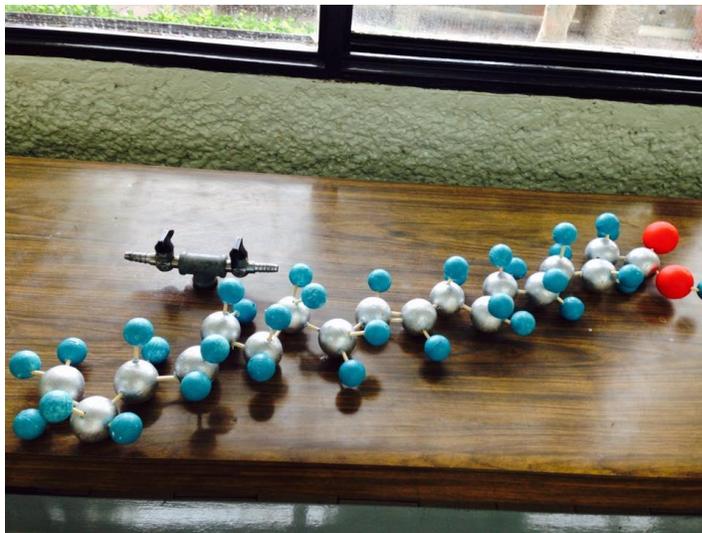


Fig. 3

Resultado final de la primera maqueta tridimensional, formada de carbonos, oxígenos e hidrógenos. Basada en alimentos constituidos por grasas TRANS.

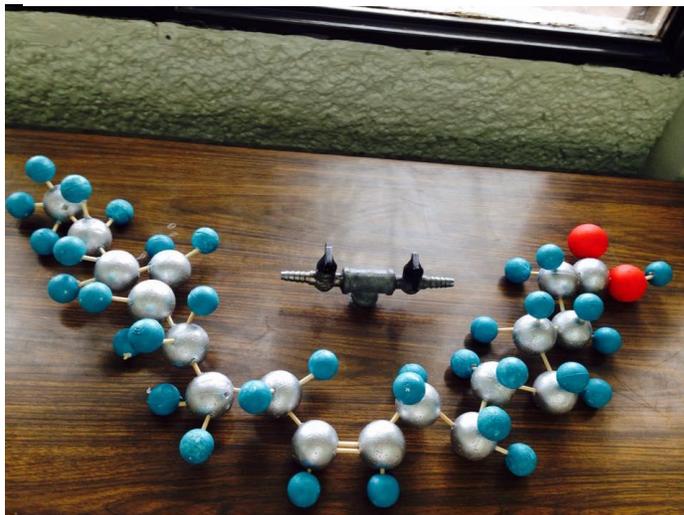


Fig. 4

Muestra del resultado final, de la segunda maqueta tridimensional a comprobar. Compuesta también por hidrógenos, Oxígenos y Carbonos. Basada en alimentos constituidos por grasas CIS.

CONCLUSIONES

A través de esta investigación, pudimos llegar a la conclusión de que la relación entre la química y las matemáticas es 100% real y necesaria ya que las matemáticas no sólo influyen en los procedimientos y operaciones, sino también en la geometría de la estructura de las moléculas, considerando que la orientación del ángulo de doble enlace puede modificarse por el sobrecalentamiento de la grasa transformando sus características químicas.

Al comprender esto, podemos observar que el solo hecho de que cambie el ángulo de la estructura de las moléculas, puede ser perjudicial para la salud el consumo excesivo de este tipo de grasas.

FUENTES BIBLIOHEMEROGRÁFICAS Y DE INTERNET BIBLIOGRÁFICAS

1. Colera Jiménez, José (03 de 2004). Geometria analítica de l'espai, matemàtiques, Batxillerat. Exercicis (en catalán) (1 edición). Editorial Barcanova, S.A. p. 48
2. Gottau G. (2010). El efecto en el organismo de los diferentes tipos de grasas. Recuperado el 20 de Septiembre 2014 de <http://www.vitonica.com/grasas/el-efecto-sobre-el-organismo-de-los-diferentes-tipos-de-grasas>
3. Just another WordPress.com site (2012). Matemáticas y química: una relación necesaria. Recuperado el 20 de Septiembre de 2014 de <http://educacionquimica.wordpress.com/2012/06/18/matematicas-y-quimica-una-necesaria-relacion/>
4. Rees, Paul K. (11 de 1972). Geometría analítica (1 edición). Editorial Reverté, S.A. p. 292.
5. Ríos Santos, Agustín (05 de 2004). Geometría analítica (1 edición). Editorial Ecir, S.A. p. 48
6. Rozas Isabel. (2011). Química Matemática: aplicación de métodos matemáticos en la química. School of Chemistry, University of Dublin, Trinity College, Ireland recuperado el 20 de Septiembre 2014 de <http://www.imus.us.es/ACT/RSME-RSEQ-2011/php/rozas.pdf>