QUÍMICA

2º Bachillerato

Métodos Matemáticos

Prof. Jorge Rojo Carrascosa

Índice general

Capítulo 1

MÉTODOS MATEMÁTICOS PARA QUÍMICA

Todas las ciencias, y especialmente la Física y la Química, a la hora de desarrollar las distintas teorías e hipótesis, deben de utilizar las matemáticas.

Por ello, es necesario recordar algunas de las técnicas ya estudiadas en cursos anteriores, o actuales, que nos permitan abordar con exito los problemas que se nos plantean en la asignatura. Puesto que este documento es sólo un resumén de técnicas matemáticas para Física y Química, en ningún momento debe reemplazar o servir de estudio para la teoría descrita en la asignatura de matemáticas.

1.1. FACTORES DE CONVERSIÓN

Es una operación matemática que permite cambiar de unidades teniendo en cuenta productos de fracciones donde cada una de ellas es la unidad. De esta manera, se hace más elegante, más rápido y con una mayor claridad el calculo en problemas de Física y Química sin tener que utilizar reglas de tres.

Las fracciones que vamos colocando son unitarias por que el numerador y el denominador expresan cantidades iguales en unidades de medida distintas.

$$100\ \frac{\cancel{km}}{\cancel{h}} \cdot \frac{1\ \cancel{h}}{3600\ s} \cdot \frac{1000\ m}{1\ \cancel{km}} = 27,78\ \frac{m}{s}$$

Podemos observar como las fracciones interpuestas en el cálculo son unitarias puesto que expresan la misma cantidad en distintos multiplos y submultiplos.

Sin embargo, no sólo sirven para realizar cambios de unidades. También podemos utilizarlas para realizar calculos más complejos en los que intervienen relaciones entre distintas dimensiones. En este caso, es fundamental realizar un pequeño análisis dimensional de las unidades expresadas en la resolución de la variable problema.

Un ácido hipocloroso concentrado de densidad 1,6 g/ml tiene una pureza del 90 %. Calcula su Molaridad.

A partir de los datos de densidad de la disolución podemos hallar la concentración en g/l del ácido hipocloroso; posteriormente hallamos su molaridad teniendo en cuenta la masa molecular del ácido.

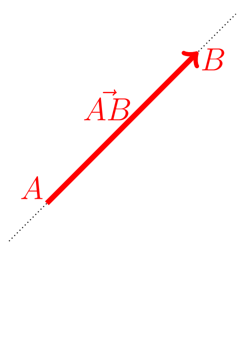
$$\frac{1,6\ \cancel{g\ disolución}}{1\ \cancel{ml\ disolución}} \cdot \frac{90\ \cancel{g\ ácido}}{100\ \cancel{g\ disolución}} \frac{10^3\ \cancel{ml}}{1\ l\ dis.} \cdot \frac{1\ mol\ ácido}{52,5\ \cancel{g\ ácido}} = 2,74\ \frac{moles\ \mathrm{HClO}}{l\ disolución}$$

1.2. VECTORES

Los vectores del plano al definirse de forma bidimensional pueden ser representados mediante cualquier sistema de referencia ortonormal, por tanto, utilizaremos como sistema de referencia los ejes cartesianos y como base canónica de ese sistema de referencia, la formada por el par de vectores independientes y ortonomales, $B = \left\{\vec{i}, \vec{j}\right\}$, donde los vectores unitario se define como $\vec{i} = (1,0)$ y $\vec{j} = (0,1)$.

Un vector fijo $\vec{AB}$ es un segmento orientado que tiene su origen en el punto A y su extremo en el punto B. Un vector libre $\vec{AB}$, es aquel que se puede aplicar libremente en cualquier punto del plano que se desee, no tiene un origen ni un extremo fijos del plano como si lo tienen los vectores libres. Cualquier vector (libre o fijo), $\vec{AB} = (x\vec{i}, y\vec{j})$, tiene tres características:

1. **MODULO**: Longitud del vector. Dado por, $|\vec{AB}| = \sqrt{x^2 + y^2}$
2. **DIRECCIÓN**: Viene dado por la recta que pasa por AB.
3. **SENTIDO**: El recorrido de la recta, es decir de $A \rightarrow B$ o de $B \rightarrow A$. Éste viene indicado por el sentido de la flecha.



1.2.1. SUMA DE VECTORES LIBRES

Analiticamente, la suma (o resta) de dos vectores cualesquiera, $\vec{u} = (u_x\vec{i}, u_y\vec{j})$ y $\vec{v} = (v_x\vec{i}, v_y\vec{j})$, viene dada por la suma de sus componentes, es decir,

$$\vec{w} = (\vec{u} \pm \vec{v}) = ((u_x \pm v_x)\vec{i}, (u_y \pm v_y)\vec{j})$$

De forma geométrica podemos utilizar la regla del paralelogramo o el método del triángulo.

1.2.2. PRODUCTO DE UN NÚMERO REAL POR UN VECTOR

Cuando multiplicamos un vector por un escalar $k > 0$ se obtiene otro vector de igual dirección y sentido (si $k < 0$ el sentido delvector resultante es contrario) pero cuyo módulo es k veces mayor que el módulo del vector (si $k = 0$ se obtiene el vector nulo).
Analiticamente nos quedaria

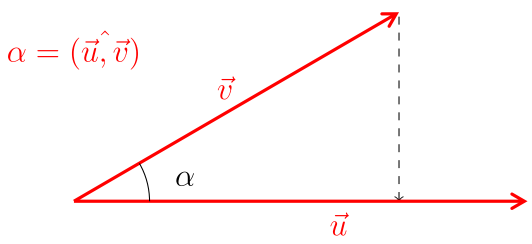
$$\vec{w} = k\ \vec{u} = (k\ u_x\vec{i}, k\ u_y\vec{j})$$

1.2.3. PRODUCTO ESCALAR

Una de las operaciones más importantes definidas sobre dos vectores en el espacio euclídeo es el producto escalar. Con ésta podemos hallar longitudes, ángulos u ortonormalidad de los vectores implicados en la operación. Analíticamente podemos expresarla de la siguientes forma,

$$\vec{u} \cdot \vec{v} = |\vec{u}||\vec{v}| \cos(\widehat{\vec{u}, \vec{v}})$$

Donde el primer miembro es el producto de dos vectores componente por componente, $\vec{u} \cdot \vec{v} = \vec{u}_x\vec{v}_x + \vec{u}_y\vec{v}_y$, y el segundo el producto de sus módulos por el coseno del ángulo que forman. **El resultado del producto escalar es un escalar, es decir, un número**.
La interpretación geométrica nos muestra que el producto escalar es igual al módulo de uno de ellos por la proyección del otro por el primero.



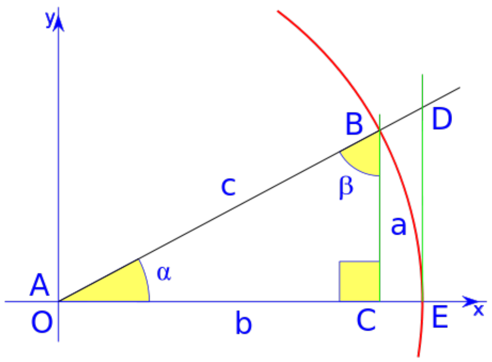
Si $\vec{u} \cdot \vec{v} = 0$ los vectores son perpendiculares o uno de los vectores es el vector nulo.

1.3. TRIGONOMETRÍA

La trigonometria es una rama de las matemáticas que estudia los triángulos. En el estudio geométrico de un triángulo se definieron una serie de funciones propias que con el paso de los años se denominan razones trigonométricas.

1.3.1. RAZONES TRIGONOMÉTRICAS FUNDAMENTALES

Dado un triángulo rectángulo cualquiera se definen las razones trigonometricas para el ángulo α de la forma,



$$\boxed{\sin\alpha = \frac{cateto\ opuesto}{hipotenusa} = \frac{a}{c}}$$

$$\boxed{\cos\alpha = \frac{cateto\ contiguo}{hipotenusa} = \frac{b}{c}}$$

$$\boxed{\tan\alpha = \frac{cateto\ opuesto}{cateto\ contiguo} = \frac{\sin}{\cos} = \frac{a}{b}}$$

De igual forma, si sobre el triángulo rectángulo inscrito en la circunferencia goniométrica aplicamos el teorema de Pitágoras, obtenemos la ecuación fundamental de la trigonometría.

$$a^2 + b^2 = h^2 \rightarrow \quad \boxed{\sin^2\alpha + \cos^2\alpha = 1}$$

Siendo h la hipotenusa, $a = \sin\alpha$ y $b = \cos\alpha$.

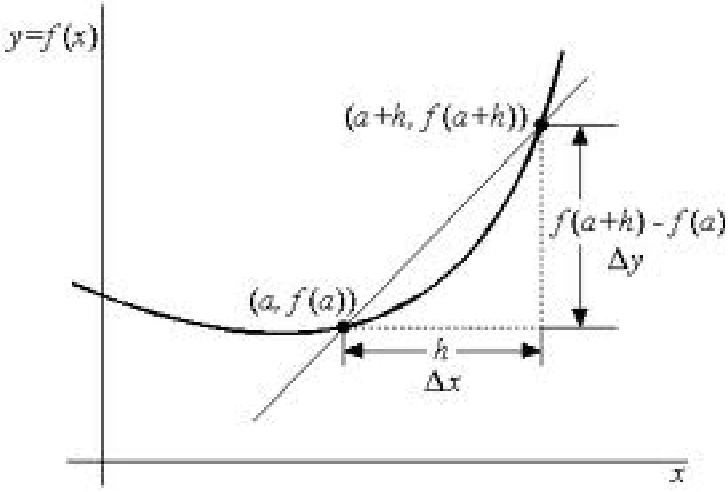
1.4. DERIVADAS

La derivada de una función mide la rapidez con la que una función crece o decrece. Es decir, según cambie de valor la variable independiente x, la variable dependiente y podra cambiar, aumentando o disminuyendo su valor, o permanecer constante.

Por ejemplo, en Física, según varía el tiempo, variable independiente, observaremos como cambia el valor del espacio. Esto es lo que se conoce como velocidad.

1.4.1. TASA DE VARIACIÓN MEDIA

Dada una función cualquiera $y = f(x)$, se llama Tasa de Variación Media (TVM), a la variación (creciente o decreciente) que experimenta f cuando la variable independiente pasa de x a $x + h$, esto es, tiene un incremento de h unidades,



Por tanto, la tasa de variación media mide la rapidez de crecimiento o decrecimiento de una función en un intervalo. Matemáticamente se expresa como,

$$t_m = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}$$

En física podríamos estar hablando de la velocidad media o aceleración media.

1.4.2. TASA DE VARIACIÓN INSTANTANEA, T.V.I.

En este caso nos centramos en un sólo punto. Por tanto, se define como el límite de la tasa de varación media cuando el intervalo tomado para la variable independiente es muy pequeño, infinitesimalmente pequeño. Esta Tasa queda de manifiesto en muchas circunstancias, por ejemplo cuando medimos la pendiente de una carretera, la velocidad, la presión hidrostática en un punto, la emisión de particulas por un cuerpo,. . . . Llamamos **derivada** de una función f en un punto $x = a$ al límite, si es que existe de:

$$\boxed{f'(a) = \lim_{h \to 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h}}$$

Geometricamente, la derivada representa el valor de la pendiente de la recta tangente a la gráfica de esa función $y = f(x)$ en el punto $P(a, f(a))$.

Finalmente, no siempre vamos a tener que trabajar con este límite para hallar la derivada de un función, puesto que las funciones podemos acotarlas según distintos tipos, potenciales, trigonométricas, exponenciales,..., al realizar sus derivadas se encuentran estructuras analogas de cada tipo y se hace uso de tablas de derivadas. Por ejemplo, para la función potencial,

$$f(t) = at^n \Rightarrow f'(t) = ant^{n-1}$$

1.4.3. TABLA DE DERIVADAS

Aún así, en un documento de la misma unidad, os dejo la tabla completa de derivadas para su posible uso en la asignatura.

1.5. INTEGRALES

Cuando tenemos dos funciones reales definidas en un mismo dominio, f y F, se dice que F es una función primitiva de f, si F tiene por derivada f.

$$F'(x) = f(x)$$

La operación que permite obtener una primitiva F a partir de una función f se conoce como **integración**. El cálculo integral es una herramienta que nos permite hallar áreas, longitudes, volúmenes de cuerpos en revolución, desarrollo de software, analisis de riesgos,..., realmente cualquier función puede expresarse graficamente y así analizar variable de crecimiento y decrecimiento, por tanto, el análisis integral y diferencial adquieren una dimensión enorme en el desarrollo de cualquier empresa o área científica.

Al igual que en derivación, los distintos tipos de funciones responden a una serie de reglas que nos permiten agruparlas en una tabla. Por ejemplo, la integral de una función potencial, sería:

$$\int ax^n dx = a\frac{x^{n+1}}{n+1} + C$$

1.5.1. TABLA DE INTEGRALES

En un documento de la misma unidad, os dejo la tabla completa de integrales.