Pontificia Universidad JAVERIANA Bogotá

UNIVERSITAS SCIENTIARUM
Revista de la Facultad de Ciencias
Vol. 10, N° 2, 87-89

FUNCIONES QUÍMICAS COMO FUNCIONES MATEMÁTICAS

B. Villegas

Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias, Pontificia Universidad Javeriana, Cra.7ª # 43-82,Bogotá.
bayardo.villegas@javeriana.edu.co

ABSTRACT

The concept of function is important in mathematics and sciences. In this paper we propose a chemical-mathematical function and explain how it works; some particular examples from it are illustrated.

Key words: mathematical function, chemical function, functional group, functional machine, valence.

RESUMEN

Dado el concepto de función, uno de los más importantes en la matemática moderna, en el presente escrito se propone una función químico-matemática generalizada, se establece cómo opera y se dan ejemplos de funciones particulares derivadas de ella; además se anotan algunos alcances del concepto y de la función químico-matemática.

Palabras clave: función matemática, función química, grupo funcional, máquina funcional, valencia.

INTRODUCCIÓN

El concepto de "función matemática" es enunciable como sigue: dados los conjuntos no vacíos X y Y, una *función f de X a Y*, denotado $X \xrightarrow{f} Y$, es una asignación que a **cada** elemento x de X le asigna un **único** elemento y, denotado $f(x)$, de Y (X y Y son conjuntos cualesquiera, sólo en particular numéricos). Como muestra, en bioquímica, se tiene (Waterman, 1995): dados los conjuntos $R = \{A, C, G, U\}$ de ribonucleótidos, $R \times R \times R = \{(x_1, x_2, x_3) | x_i \in R\}$ y $D = \{a \,|a$ es un aminoácido codificable o una señal de pare$\}$, $R \times R \times R \xrightarrow{c} D$ es la función "código genético" tal que, por ej., $c((U, U, C))$ = fenilalanina (en el apéndice se encuentran algunas aclaraciones pertinentes a la terminología y simbología matemáticas usadas en este artículo).

MARCO TEÓRICO

Las leyes "de las proporciones definidas", "de las proporciones múltiples" y "de las proporciones recíprocas" (Babor & Ibarz, 1962) establecidas, respectivamente, por Louis Joseph Proust en1801, John Dalton en 1803 y Jeremías Benjamín Richter en 1792, determinaron posteriormente las fórmulas químicas como actualmente se conocen. Se enuncian, en su orden, así: *cuando dos o más elementos se combinan para formar un determinado compuesto lo hacen en una relación de peso invariable*, *las cantidades de un mismo elemento que se unen con una cantidad fija de otro elemento para formar en cada caso un compuesto distinto están en la relación de números enteros sencillos* y, *los pesos de elementos diferentes que se combinan con un mismo peso de un elemento dado son* *los pesos relativos de aquellos elementos cuando se combinan entre sí o bien múltiplos o submúltiplos de estos pesos*: como alternativa, aplicable no sólo a elementos, en el siguiente párrafo se propone una "función químico-matemática generalizada" (FQMG).

Dados los conjuntos *M* de moléculas y *R* de "radicales" químicos X^i (mono o poliatómicos, iónicos o covalentes), con valencia $i \neq 0$, sean el "grupo funcional químico" (GFQ) B^k en *R* y $A = \{A^j \in R \mid A^j$ combinable con $B^k\}$: el símbolo B^k también sirve, en cuanto a uso matemático, para denotar la FQMG.

$$A \xrightarrow{B^k} M$$

y representarla mediante el diagrama de "máquina funcional" (figura 1).

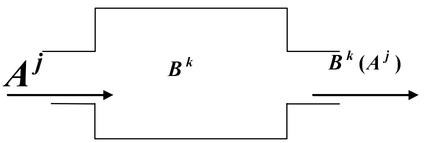

Figura 1. Máquina funcional

¿Cuál es la idea esencial en la concepción funcional matemática?: hay algo, una "máquina" abstracta (B^k en este caso), de la cual no es necesario conocer, en principio, sus piezas ni procesos (son del campo de cada ciencia, acá la química), una caja negra que transforma cada A^j de *A* en una única "imagen" $B^k(A^j) = A_kB_j$ de *M*, donde tal igualdad es equivalente a la notación química $A^j + B^k \rightarrow A_kB_j$, teniéndose, pues, que el GFQ determina la definición funcional matemática (en A_kB_j subíndices uno se omiten y si tienen un factor común se simplifican por él). En particular, dados $B^k = O^2$ (el GFQ bivalente "óxido") y $A = \{A^j \mid A^j$ es un no-metal$\}$, la función $A \xrightarrow{O^2} M$, denominada en química "óxido ácido", es tal que, por ej., $O^2(S^4) = S_2O_4 = S_1O_2 = SO_2$ (óxido ácido sulfuroso), $O^2(O^2) = O - O = O_2$ (molécula de oxígeno).

Otros ejemplos: $(PO_4)^3(Ca^2) = Ca_3(PO_4)_2$ (fosfato de calcio), $(OH)^1((CH_3)^1) = CH_3 - OH$ (metanol).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El concepto de función da una percepción holística de ciertos fenómenos al transformar, mentalmente, **todo** un conjunto en **todo** un subconjunto de otro, es decir, el cambio de paradigma es total al pasar de pensar, por ejemplo en química, $A^j + B^k \rightarrow A_kB_j$ a $A \xrightarrow{B^k} M$: pedagógicamente tiene la ventaja de que combinaciones de diferentes A^j con cierto B^k se ven sólo como casos particulares de un todo integrado; aún más, diferentes funciones químicas B^k también sólo lo son de la FQMG.

Dados ciertos conjuntos *X* y *Y* en los cuales se observan relaciones funcionales entre elementos de uno y otro, el hecho mismo de acostumbrarse a pensar funcionalmente permite plantear una función $X \xrightarrow{f} Y$ que induzca a preguntarse si otros elementos pertenecen a ella y esto de otra manera difícilmente imaginable: para muestra, dados $S = \{s \mid s$ es un simbionte$\}$ y $S/S = \{s_1/s_2 \mid s_1, s_2 \in S$ y s_1/s_2 es un complejo simbiótico$\}$, $S \times S \xrightarrow{\boldsymbol{S}} S/S$ es la función "simbiosis" tal que, por ej., **S**((*Pisolithus tinctorius*, *Eucalyptus sp.*)) = *Pisolithus tinctorius*/*Eucalyptus sp.* = micorriza (Sadava *et al.*, 2004), y entonces es plausible, por lo menos desde el punto de vista funcional, la hipótesis de Villegas (2000) de una asociación prebiótica de mutuo beneficio entre ribozimas (son RNAs autocatalíticos) y priones, pues se tiene (o se supone), para cada uno de sus componentes, existencia prebiótica (Sinkovics *et al.*, 1998) y autorreplicación (Sadava *et al.*, 2004; Prusiner, 1998), así no existan fósiles que permitan imaginar tal asociación (incidentalmente es de anotar que en Gabus *et al.* (2001) habría apoyo a tal hipótesis pues dicen que el prion tiene propiedades de unión a RNA como las de la proteína NCp7 de la nucleocápside del virus VIH-1 del SIDA).

CONCLUSIONES

La FQMG es una extensión a las leyes de Proust, de Dalton y de Richter, pues es aplicable a conjuntos más amplios que a de sólo elementos químicos.

El concepto de función descarna lo esencial de aquello que no lo es y entonces es útil, como en la matemática, para tratar meollos de problemas en ciencias diferentes a ésta.

Ya que en una función $X \xrightarrow{f} Y$, de *f*, en cuanto caja negra, no es necesario conocer sus piezas ni procesos, el concepto de función es sencillo (aunque de larga y tortuosa evolución hasta su versión moderna), asimilable y aplicable, como en los ejemplos acá dados.

LITERATURA CITADA

Babor, J.A., Ibarz, J. 1962. Química general moderna. Editorial Marín, S. A. Barcelona, España.

Gabus, C., Derrington, E., Leblanc, P., Chnaiderman, J., Dormont, D., Swietnicki, W., Morillas, M., Surewicz, W. K., Marc, D., Nandi, P., Darlix, J.-L. 2001. The prion protein has RNA binding and chaperoning properties of nucleocapsid protein NCp7 of HIV-1. J. Biol. Chem. 27(22): 19301-9.

Prusiner, S.B. 1998. Prions. Proc Natl Acad Sci USA 95: 13363-83.

Sadava, D.,Purves, W.K., Orians, G.H., Heller, C. 2004. Life, the science of biology. Sinauer Associates Inc. Sunderland, USA.

Sinkovics, J., Horvath, J., Horak, A. 1998. The origin and evolution of viruses (a review). Acta Microbiol Immunol Hung 45(3-4): 349-90.

Villegas, B. 2000. Hipotética etapa prebiótica. Universitas Scientiarum 5(1): 25-8.

Waterman, M.S. 1995. Introduction to computational biology. Chapman & Hall, London, UK

APÉNDICE

En el contexto de funciones "asignación" es sinónimo de regla, ley o correspondencia.

Sean A_1, A_2,…, A_n conjuntos cualesquiera: el conjunto $\{(x_1,x_2,\ldots,x_n) \mid x \in A_i\}$ se denomina *el producto cartesiano* A_1 x A_2 x …x A_n. Ejemplos: dados $A_1 = \{a, b\}$ y $A_2 = \{1, 2, 3\}$, A_1 x A_2 = {(a, 1), (a, 2), (a, 3), (b, 1), (b, 2), (b, 3)}; en el texto de este artículo, *R* x *R* x *R* es el producto cartesiano del conjunto de ribonucleótidos *R* tres veces por sí mismo.

Recibido: 15.03.2005
Aceptado: 11.09.2005