

	Contenidos Programáticos Programas de Posgrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	1 de 9

FACULTAD: CIENCIAS BÁSICAS

PROGRAMA: MAESTRÍA EN QUÍMICA

DEPARTAMENTO DE: QUÍMICA

CURSO: **CÓDIGO:**

ÁREA:

REQUISITOS: **CORREQUISITO:**

CRÉDITOS: **TIPO DE CURSO:**

FECHA ÚLTIMA ACTUALIZACIÓN

JUSTIFICACIÓN

El programa de maestría en química de la Universidad de Pamplona busca formar investigadores con conocimientos generales sobre la química y a su vez con conocimiento especial sobre alguna especialidad de la química actual. Es por ello que este curso pretende impartir las generalidades teóricas de la química inorgánica y a su vez introducir al estudiante en una de las fortalezas investigativas de la Universidad de Pamplona, que la hace singular en el contexto nacional e internacional, i.e. la química matemática.

Uno de los pilares de la formación química es el conocimiento de los fundamentos de la química inorgánica, esto incluye los elementos básicos de su lenguaje como la nomenclatura de los compuestos inorgánicos, el tipo de reacciones y los mecanismos que las dirigen y las diversas teorías que se han formulado para la explicación del enlace presente en este tipo de compuestos. Por otra parte, las investigaciones actuales en química, además de dirigirse a la bioquímica se concentran también en el desarrollo de nuevos materiales, que tiene un alto contenido de conocimiento químico inorgánico y del estado sólido, temas estudiados en este curso.

La química, como cualquier otra ciencia, se fundamenta en el análisis crítico de su campo de acción, en este caso la materia y sus transformaciones. Para ello hace uso de un método que le permite entender su objeto de estudio y predecir los posteriores comportamientos de éste. La herramienta utilizada para llevar a cabo dicho análisis y dichas predicciones hace uso del lenguaje matemático y de teorías matemáticas particulares. Es importante para un químico desvelar cómo el saber químico está permeado por las matemáticas, cómo puede hacer uso de ellas para entender mejor su diario quehacer y cómo ellas se están aplicando en la química del siglo XXI.

	Contenidos Programáticos Programas de Posgrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	2 de 9

OBJETIVO GENERAL

Hacer que el estudiante apropie los elementos del lenguaje de la química inorgánica, i.e. nomenclatura, mecanismos de reacción y teorías de enlace químico de compuestos inorgánicos. Mostrar que el saber químico encaja dentro del acervo matemático y estimular al estudiante para que desarrolle puntos de vista matemáticos del conocimiento químico actual que lo lleven a proponer nuevas tendencias químico-matemáticas.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Mostrar las razones que llevaron al desarrollo de la química inorgánica.
- Presentar las teorías del enlace de coordinación con su respectivo formalismo matemático.
- Estudiar los diferentes mecanismos de las reacciones de los compuestos inorgánicos.
- Presentar elementos introductorios del estado sólido.
- Mostrar cómo la química se ha nutrido de conceptos matemáticos a lo largo de su historia y cómo la relación inversa también se ha presentado.
- Estudiar algunas de las áreas de la química matemática de mayor desarrollo en la actualidad y algunas en proceso de desarrollo.
- Incentivar la interpretación matemática del saber químico.

COMPETENCIAS

Interpretativas:

- Asimilación de resultados experimentales enmarcados en el contexto histórico en el que fueron desarrollados.
- Habilidad para comprender textos científicos.
- Habilidad para comprender textos históricos y documentos científicos de otras áreas como las matemáticas, la biología y la sociología.
- Habilidad para comprender: dibujos de procedimientos químicos, gráficas, matrices, diagramas, tablas, grafos, matrices y diagramas de redes de reacciones químicas

	Contenidos Programáticos Programas de Posgrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	3 de 9

Argumentativas:

- Explicación de la razón, el medio y la causa que generaron los hechos históricos relevantes de la historia de la química y en especial de la química inorgánica.
- Justificación de la necesidad del rigor científico y matemático para enunciar argumentos robustos.
- Presentación de ejemplos y contraejemplos en la comprobación de hipótesis.
- Habilidad para relacionar conceptos de la vida diaria con conceptos de la química inorgánica y la química matemática.
- Habilidad para relacionar conceptos matemáticos con conceptos químicos y químicos con matemáticos.
- comprobación de algunos teoremas matemáticos.
- Generación de conclusiones en el contexto estudiado.

Propositivas:

- Habilidad para detectar preguntas científicas aún no estudiadas.
- Habilidad para detectar hechos históricos y epistemológicos aún no estudiados, así como conceptos químicos susceptibles de ser matematizados.
- Habilidad para descubrir regularidades históricas, epistemológicas y conceptuales en el desarrollo de la química, la química inorgánica y la historia y filosofía de la química.
- Resolución de problemas químicos e incluso de la vida diaria mediante la aplicación de conceptos de la química inorgánica.
- Resolución de problemas químicos mediante la aplicación de conceptos matemáticos.

UNIDAD 1 Historia, nomenclatura y estructura de los compuestos de coordinación

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Historia de la química de coordinación: Primeros compuestos de coordinación, aportes de Jørgensen. Teoría de coordinación de Werner. Uso de la simetría y las redes de reacción en la elucidación de Werner.	1	3
Nomenclatura: Tipos de ligandos y aspectos generales de la nomenclatura de los compuestos de coordinación.	1	3

	Contenidos Programáticos Programas de Posgrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	4 de 9

Estructura: Distribución espacial de los ligandos alrededor de un átomo central, esferas octaédricas, planocuadradas y tetraédricas, entre otras. Isomería en los compuestos de coordinación.	2	6
--	---	---

UNIDAD 2 Teorías de enlace, propiedades de los complejos de coordinación y mecanismos de reacción

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Teorías de enlace: Teoría ácido-base de Lewis, aporte de Pearson (ácidos y bases blandos y duros), introducción a la teoría del campo cristalino.	3	9
Teoría del campo cristalino: Graficación de los orbitales atómicos a partir de su función de onda. Efecto de los ligandos sobre la distribución energética de los orbitales (desdoblamiento). Aplicaciones de la teoría del campo cristalino. Serie espectroquímica.	4	12
Propiedades de los compuestos inorgánicos: Propiedades magnéticas. Colores de los compuestos inorgánicos. Reglas de Russell-Saunders.	3	9
Cinética y mecanismos de reacción: Reacciones de sustitución, de disociación, de adición, de óxido-reducción, de adición oxidativa, de eliminación reductiva. Compuestos lábiles e inertes. Mecanismos disociativos y asociativos en la sustitución. Reacciones de transferencia de electrones. Sustitución en complejos planocuadrados. Cinética del efecto trans.	4	12

	Contenidos Programáticos Programas de Posgrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	5 de 9

UNIDAD 3 Química del estado sólido

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Tipos de cristales: Iónicos, metálicos, covalentes y atómicos moleculares.	2	6
Redes cristalinas: Redes tipo A: cúbica, cúbica centrada en el cuerpo, empaquetamiento cúbico compacto, empaquetamiento hexagonal compacto. Redes tipo AB _n : Huecos cúbicos, octaédricos y tetraédricos. Relación de radios. Estructura espinela.	2	6
Aspectos energéticos del estado sólido: Energía reticular. Radios iónicos.	2	6

UNIDAD 4 Quimiología

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Clasificaciones y topología: Sistemas de clasificación, análisis de agrupamientos, topología, algunas aplicaciones.	5	15

UNIDAD 5 Teoría del orden

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Escalafonamientos: Relación de orden, diagramas de Hasse, ranking, METEOR, grado de dominancia y de separación.	5	15
Estimaciones: Predicción de propiedades, métodos interpolativos poséticos.	5	15

	Contenidos Programáticos Programas de Posgrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	6 de 9

UNIDAD 6 Análisis formal de conceptos

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Conceptos y sus relaciones: Conceptos, contexto, orden de conceptos, retículos, implicaciones y asociaciones.	5	15

UNIDAD 7 Teoría de grafos

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Grafos: Representaciones matemáticas, hipótesis de la relación entre la estructura y la actividad, selección de variables, métodos de regresión.	4	12

METODOLOGÍA

Se creará una página en internet donde el docente depositará información relevante para cada tema. Este sitio en internet estará vinculado a la página del laboratorio de química teórica de la Universidad de Pamplona. Algunas de las fuentes bibliográficas que se emplearán están en la biblioteca de la Universidad, el material adicional que se requiera se depositará con anterioridad a la clase en la página en cuestión. En la medida de lo posible, dependiendo de la disponibilidad de los proyectores en la Universidad, estos se emplearán en las clases. La explicación detallada de los temas, así como los cálculos numéricos se desarrollarán en el tablero. Cuando sea necesario el uso de modelos moleculares se llevarán a clase para su uso.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

Cada tres unidades el estudiante deberá entregar un trabajo escrito que será depositado en la página en internet del curso. Cada uno equivaldrá al 10% de la nota final.

Al final de cada unidad el estudiante presentará una evaluación, cada una equivaldrá al 10% de la nota final.

Al final del curso cada estudiante hará una exposición oral en la que muestre los resultados de la aplicación de por lo menos uno de los temas tratados en las unidades a un tema de su interés. Esta presentación equivaldrá al 20% de la nota final.

	Contenidos Programáticos Programas de Posgrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	7 de 9

BIBLIOGRAFÍA DISPONIBLE EN UNIDAD DE RECURSOS BIBLIOGRÁFICOS DE LA UNIVERSIDAD DE PAMPLONA

Rodgers, G. E. Química inorgánica, McGraw Hill: Fernández ciudad, 1995.

Cotton, F. A.; Wilkinson, G.; Murillo, C. A.; Bochmann, M. Advanced inorganic chemistry, 3th Edition, Interscience publishers: New York, 1972.

Restrepo, G. Química matemática y la Universidad de Pamplona. Bistua, 2005, 3, 61-76.

Brüggemann, R.; Bartel, H.-G. A Theoretical Concept To Rank Environmentally Significant Chemicals. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1999, 39, 211-217.

Trinajstić, N. Chemical graph theory, CRC Press: Boca Raton, FL, 1992.

Carpineto, C.; Romano, G. Concept data analysis: Theory and applications, John Wiley & Sons: Hoboken, 2004

Todeschini, R.; Consonni, V. Handbook of molecular descriptors; Wiley-VCH: Weinheim, 2000.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Asimov, I. Breve historia de la química, Alianza editorial: Madrid, 1998.

Werner, A. On the constitution and configuration of higher-order compounds. (Nobel lecture 1913).

Koubek, E.; Elert, M. A demonstration of crystal-field effects in octahedral complexes. J. Chem. Educ., 1996, 73, 947.

Companion, A. L.; Komarynsky, M. A. Crystal field splitting diagrams. J. Chem. Educ., 1964, 41, 257.

Baker, A. T. The ligand field spectra of copper(II) complexes. J. Chem. Educ., 1998, 75, 98.

Lambert, J. L. Spinel models for demonstrating crystal field stabilization. J. Chem. Educ., 1964, 41, 41.



Contenidos Programáticos Programas de Posgrado

Código

FGA-23 v.03

Página

8 de 9

Restrepo, G.; Mesa, H.; Llanos, E. J.; Villaveces, J. L. Topological study of the periodic system. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 2004, 44, 68-75.

Restrepo, G.; Villaveces, J. L. From trees (dendrograms and consensus trees) to topology. *Croat. Chem. Acta* 2005, 78, 275-281.

Restrepo, G.; Mesa, H.; Villaveces, J. L. On the topological sense of chemical sets. *J. Math. Chem.* 2006, 39, 363-376.

Restrepo, G.; Llanos, E. J.; Mesa, H. Topological space of the chemical elements and its properties. *J. Math. Chem.* 2006, 39, 401-416.

Restrepo, G.; Mesa, H.; Llanos, E. J.; Villaveces, J. L. Topological study of the periodic system. In *The mathematics of the periodic table*; King, R. B.; Rouvray, D. H., Eds.; Nova: New York, USA, 2006; Chapter 5, pp 75-100.

Daza, M. C.; Restrepo, G.; Uribe, E. A.; Villaveces, J. L. Quantum chemical and chemotopological study of fourth row monohydrides. *Chem. Phys. Lett.* 2006, 428, 55-61.

Brüggemann, R.; Carlsen, L. *Partial order in environmental sciences and chemistry*; Springer: Berlin, 2006.

Brüggemann, R.; Voigt, K.; Restrepo, G.; Simon, U. The concept of stability fields and hot spots in ranking of environmental chemicals. *Environ. Modell. Softw.* 2008, 23, 1000-1012.

Restrepo, G.; Weckert, M.; Brüggemann, R.; Gerstmann, S.; Frank, H. Ranking of refrigerants, *Environ. Sci. Technol.* 2008, 42, 2925-2930.

Restrepo, G.; Brüggemann, R.; Weckert, M.; Gerstmann, S.; Frank, H. Ranking patterns, an application to refrigerants. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 2008, 59, 555-584.

Restrepo, G.; Brüggemann, R. Dominance and separability in posets, their application to isoelectronic species with equal total nuclear charge. *J. Math. Chem.* 2008, 44, 577-602.

Kerber, A. Contexts, concepts, implications and hypotheses. In Brüggemann, R.; Carlsen, L. *Partial order in environmental sciences and chemistry*; Springer: Berlin, 2006.

	Contenidos Programáticos Programas de Posgrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	9 de 9

Ganter, B.; Wille, R. Formal Concept Analysis: Mathematical Foundations; Springer-Verlag: Berlin, 1998.

Lounkine, E.; Auer, J.; Bajorath, J. Formal concept analysis for the identification of molecular fragment combinations specific for active and highly potent compounds. *J. Med. Chem.* 2008, 51, 5342–5348.

Lounkine, E.; Stumpfe, D.; Bajorath, J. Molecular formal concept analysis for compound selectivity profiling in biologically annotated databases. *J. Chem. Inf. Model.* 2009, 49, 1359–1368.

Restrepo, G.; Basak, S. C.; Mills, D. SAR and QSAR approaches to mutagenicity of aromatic and heteroaromatic amines. *Curr. Comput. Aid. Drug Des.* Enviado a publicación.

Biggs, N. L.; Lloyd, E. K.; Wilson, R. J. *Graph theory 1736–1936*, Clarendon Press: Oxford, 1998.

Schroeder, L.; Sjoquist, D. L.; Stephan, P. E. *Understanding regression analysis: an introductory guide*, Sage Publications: Newbury Park, 1986.

DIRECCIONES ELECTRÓNICAS DE APOYO AL CURSO

http://www.youtube.com/watch?v=US_75CwRIUM

<http://www.iamc-online.org/>