

	Contenidos Programáticos Programas de Posgrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	1 de 4

FACULTAD: CIENCIAS BÁSICAS

PROGRAMA: MAESTRÍA EN QUÍMICA

DEPARTAMENTO DE: QUÍMICA

CURSO: **CÓDIGO:**

ÁREA:

REQUISITOS: **CORREQUISITO:**

CRÉDITOS: **TIPO DE CURSO:**

FECHA ÚLTIMA ACTUALIZACIÓN

JUSTIFICACIÓN

Una de las fortalezas investigativas de la química teórica de la Universidad de Pamplona es la aplicación de la topología a la resolución de problemas químicos en lo que se ha denominado quimiotopología. Esta metodología y su uso resultan convenientes en química teórica debido al bajo costo computacional de sus procedimientos y a su alcance interdisciplinario. Es muy común, en ciencias, realizar clasificaciones para realizar predicciones, la quimiotopología resulta ser una herramienta que va más allá de las clasificaciones y da una riqueza única a los resultados de las clasificaciones.

OBJETIVO GENERAL

Hacer que el estudiante conozca los fundamentos de la topología y sus aplicaciones a la resolución de problemas químicos.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Lograr la apropiación de los fundamentos de la topología.
- Mostrar los fundamentos de la aplicación de la topología a los resultados de clasificaciones.
- Incentivar el uso de la quimiotopología en las diferentes ramas del conocimiento.

	Contenidos Programáticos Programas de Posgrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	2 de 4

COMPETENCIAS

Interpretativas:

- Asimilación de los fundamentos matemáticos de la topología.
- Habilidad para comprender textos matemáticos.
- Habilidad para comprender: diagramas de Venn, dendrogramas, gráficas, matrices y tablas.

Argumentativas:

- Explicación de las diferentes propiedades matemáticas que tiene un espacio topológico.
- Presentación de ejemplos y contraejemplos en la comprobación de hipótesis.
- Habilidad para relacionar conceptos químicos y de otras disciplinas con conceptos topológicos.
- Generación de conclusiones en el contexto estudiado.

Propositivas:

- Habilidad para detectar preguntas científicas susceptibles de ser analizadas por aplicación de la quimiotopología.
- Habilidad para sugerir cambios y mejoras en los procedimientos y algoritmos de la quimiotopología.

UNIDAD 1 Clasificaciones

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Funciones de semejanza	8	24
Metodologías de agrupamiento	7	21

UNIDAD 2 Topología

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Bases topológicas	8	24
Propiedades topológicas	7	21

	Contenidos Programáticos Programas de Posgrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	3 de 4

UNIDAD 3 Interpretación de las propiedades topológicas

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
El caso de los elementos químicos	14	42

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.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

El estudiante presentará un trabajo escrito de cada unidad que equivaldrá al 33,33% de la nota final.

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

Sokal, R. R.; Sneath, P. H. A. Principles of Numerical Taxonomy; Ed.; W. H. Freeman: San Francisco, 1963; pp 143-154.

Willet, P. Chemical Similarity Searching. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1998, 38, 983-996.

Mendelson, B. Introduction to Topology, 3rd ed.; Ed.; Dover: New York, 1990; Chapter 2, pp 29-69.

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.

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

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Mesa, H.; Restrepo, G. On dendrograms and topologies. MATCH Commun. Math. Comput. 2008, 60, 371-384.

Restrepo, G.; Mesa, H.; Llanos, E. J. Three dissimilarity measures to contrast dendrograms. J. Chem. Inf. Model. 2007, 47, 761-770.

Restrepo, G.; Pachón, L. Mathematical aspects of the periodic law. Found. Chem. 2007, 9, 189-214.

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

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.; Llanos, E. J.; Mesa, H. On the topological sense of chemical sets. J. Math. Chem. 2006, 39, 363-376.

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.

Uribe, E. A.; Daza, M. C.; Restrepo, G. Chemotopological study of the fourth period mono-hydrides. WSEAS Trans. Inf. Sci. Appl. 2005, 2, 1085-1090.

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

DIRECCIONES ELECTRÓNICAS DE APOYO AL CURSO

<http://www.r-project.org/>