

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Posgrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	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 teoría del orden a la resolución de problemas químicos. Esta teoría y su uso resultan convenientes en química teórica debido al bajo costo computacional de sus procedimientos y al alcance interdisciplinario de sus metodologías. Los tres aspectos primordiales del curso son el del escalafonamiento, tema recurrente en cualquier actividad científica al tomar decisiones; el de la predicción de propiedades de sustancias químicas, que se encuentra en el núcleo mismo de la química; y el de la derivación de conocimiento a partir de la extracción de implicaciones de un tema de estudio, tema recurrente en todo proyecto de investigación.

### OBJETIVO GENERAL

Hacer que el estudiante conozca los fundamentos de la teoría del orden y sus aplicaciones en el escalafonamiento, la predicción de sustancias y la derivación de conocimiento.

### OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Lograr la apropiación de los fundamentos de la teoría del orden.
- Mostrar los fundamentos de la aplicación de la teoría del orden al escalafonamiento.
- Mostrar los fundamentos de la teoría de la orden aplicada a la predicción de propiedades de sustancias.
- Mostrar los fundamentos del Análisis Formal de Conceptos, como metodología para derivar conocimiento.
- Incentivar el uso de la teoría del orden en las diferentes ramas del conocimiento.

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Posgrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	2 de 4

## COMPETENCIAS

<p><i>Interpretativas:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Asimilación de los fundamentos matemáticos de la teoría del orden.</li> <li>• Habilidad para comprender textos matemáticos.</li> <li>• Habilidad para comprender: diagramas de Hasse, gráficas, matrices y tablas.</li> </ul> <p><i>Argumentativas:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Explicación de las diferentes propiedades matemáticas que tiene una relación de orden.</li> <li>• Presentación de ejemplos y contraejemplos en la comprobación de hipótesis.</li> <li>• Habilidad para relacionar conceptos químicos y de otras disciplinas con conceptos de la teoría del orden.</li> <li>• Generación de conclusiones en el contexto estudiado.</li> </ul> <p><i>Propositivas:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Habilidad para detectar preguntas científicas susceptibles de ser analizadas por aplicación de la teoría del orden.</li> <li>• Habilidad para sugerir cambios y mejoras en los procedimientos y algoritmos de la teoría del orden.</li> </ul>
--

### UNIDAD 1 Escalonamiento

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Fundamentos de la teoría del orden	5	15
Representación matricial	5	15
Técnica de los diagramas de Hasse	11	15

### UNIDAD 2 Predicción de propiedades

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Ordenamiento de sustancias	8	24
Métodos predictivos	12	21

### UNIDAD 3 Análisis Formal de Conceptos

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Conceptos y su ordenamiento	8	24

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Posgrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	3 de 4

Implicaciones y asociaciones	12	21
------------------------------	----	----

### **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**

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.; Brüggemann, R.; Klein, D. Partially ordered sets: ranking and prediction of substances' properties. *Curr. Comput-Aid Drug.* 2011, 7, 133-145.

Ganter, B.; Wille, R. *Formal concept analysis: Mathematical foundations*; Springer-Verlag: Berlin, 1998.

### **BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA**

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.

Restrepo, G.; Klein, D. J. Predicting densities of nitrocubanes using partial orders. *J. Math. Chem.* 2011, 49, 1311-1321.

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Posgrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	4 de 4

#### **DIRECCIONES ELECTRÓNICAS DE APOYO AL CURSO**

<http://docs.pyhasse.org/>

[http://www.google.com.co/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=1&cad=rja&ved=0CBoQFjAA&url=http%3A%2F%2Fconexp.sourceforge.net%2F&ei=KIWAUJ-yB4rg8AS384HICg&usq=AFQjCNH4janObvgC87e-rpjxwpo\\_8XI3xg](http://www.google.com.co/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=1&cad=rja&ved=0CBoQFjAA&url=http%3A%2F%2Fconexp.sourceforge.net%2F&ei=KIWAUJ-yB4rg8AS384HICg&usq=AFQjCNH4janObvgC87e-rpjxwpo_8XI3xg)