



Universidad Veracruzana



## Programa de estudios

### 1.-Área académica

Cualquiera

### 2.-Programa educativo

Cualquiera

### 3.-Dependencia/Entidad académica

Unidad de Servicios de Apoyo en Resolución Analítica (SARA)

### 4.-Código

### 5.-Nombre de la Experiencia educativa

### 6.-Área de formación

4.-Código	5.-Nombre de la Experiencia educativa	6.-Área de formación	
		Principal	Secundaria
SARA 80005	Herramientas informáticas aplicadas a la química	Electiva	

### 7.-Valores de la experiencia educativa

Créditos	Teoría	Práctica	Total horas a la semana	Total horas al periodo	Equivalencia (s)
6	2	2	4	60	Ninguna

### 8.-Modalidad

Curso-Taller

### 9.-Oportunidades de evaluación

AGJ= Cursativa

### 10.-Requisitos

Pre-requisitos	Co-requisitos
Ninguno	Ninguno

### 11.-Características del proceso de enseñanza aprendizaje

Individual / Grupal	Máximo	Mínimo
Grupal	20	10

### 12.-Agrupación natural de la Experiencia educativa (áreas de conocimiento, academia, ejes, módulos, departamentos)

13.-Proyecto integrador

Ninguna	Ninguno
---------	---------

### 14.-Fecha

Elaboración	Modificación	Aprobación
27 de mayo 2013		

### 15.-Nombre de los académicos que participaron en la elaboración y/o modificación

Dr. Oscar García Barradas, Dra. Karina Mondragón Vásquez, Dr. Jorge G. Domínguez Chávez, Dra. Delia Hernández Romero, Dra. Ma. Remedios Mendoza López, Dr. J. Samuel Cruz Sánchez, Dr. Omar D. Muñoz Muñiz.

### 16.-Perfil del docente

Profesional en el nivel de licenciatura o posgrado en la rama disciplinar de la Química, con experiencia en investigación, el uso de herramientas informáticas aplicadas a la química; así como en el quehacer

docente en el nivel superior; preferentemente que hayan tomado cursos relacionados con el MEIF.

### 17.-Espacio

Institucional

### 18.-Relación disciplinaria

Multidisciplinaria

### 19.-Descripción

La informática es la disciplina que se encarga del estudio de métodos, procesos, técnicas y desarrollos, y su implementación en computadoras con el fin de almacenar, procesar y transmitir información y datos en formato digital, con el objetivo de potenciar la capacidad de memoria, de pensamiento y de comunicación de la humanidad. Las áreas de aplicación son prácticamente ilimitadas y encuentra en las ciencias uno de sus principales nichos de oportunidad para su desarrollo. Particularmente en la Química, el uso de las herramientas informáticas facilita los procesos de enseñanza-aprendizaje, la búsqueda de información, el planteamiento y desarrollo de proyectos científicos, y en términos generales, el desarrollo y avance de la investigación científica. Este curso, contempla aspectos básicos que todo profesional interesado en la química debe conocer y manejar para obtener información reciente que pueda aplicar en su ámbito de trabajo, o bien en el desarrollo de proyectos de investigación. Las evidencias requeridas para llevar a cabo la evaluación del curso son exámenes escritos, el desarrollo de tareas específicas, la implementación de técnicas, la redacción de proyectos y de artículos científicos.

### 20.-Justificación

En la denominada era de la información, resulta imprescindible que un profesional de cualquier área conozca y maneje herramientas informáticas tales como bases de datos, software básico de uso en su área de conocimiento y especializado para uso en investigación, que le permitan desarrollar su trabajo con un alto grado de calidad. El profesional relacionado con alguna de las ramas de la química, no es la excepción, por lo que resulta de gran importancia para la formación integral del estudiante que éste sea capaz de adaptarse de manera natural a los cambios que se presentan día tras día en el desarrollo de la química moderna enfrentando problemas y retos diversos dentro de su ejercicio profesional, mediante la aplicación del amplio arsenal de herramientas informáticas disponibles en la actualidad.

### 21.-Unidad de competencia

El estudiante aplica los saberes y recursos informáticos existentes en el campo de la química para el desarrollo de sus actividades profesionales, en un ambiente de respeto, tolerancia y responsabilidad, con la finalidad de mejorar los procesos de desarrollo de sus funciones e investigaciones.

### 22.-Articulación de los ejes

Los saberes considerados en el programa de esta experiencia educativa se relacionan con los principios básicos de la informática aplicada a la química, así como en la metodología existente para su implementación y aplicación (eje teórico), a través de la resolución de ejercicios, problemas y retos en los que se aplican herramientas computacionales específicas (eje heurístico), con responsabilidad, disciplina, constancia y respeto hacia los demás (eje axiológico).

### 23.-Saberes

Teóricos	Heurísticos	Axiológicos
<ul style="list-style-type: none"><li>La Internet<ul style="list-style-type: none"><li>Introducción</li><li>Aplicaciones de la internet</li><li>Internet y Química</li><li>Motores de búsqueda</li><li>Conceptos básicos de búsqueda en internet</li></ul></li><li>Recursos de Química en Internet<ul style="list-style-type: none"><li>Repositorios de software gratuito</li><li>Software comercial</li><li>Software básico para el estudio de las moléculas</li><li>Conceptos básicos para</li></ul></li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>Acceso, evaluación, recuperación y uso de información en fuentes diversas en español e inglés</li><li>Análisis</li><li>Aplicación de la cohesión, coherencia, adecuación y corrección en la escritura</li><li>Argumentación</li><li>Asociación de ideas</li><li>Comparación</li><li>Relación</li><li>Clasificación</li><li>Comprensión y expresión oral y escrita, en español e inglés.</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>Apertura</li><li>Apertura para la interacción y el intercambio de información</li><li>Autocrítica</li><li>Autonomía</li><li>Autorreflexión</li><li>Colaboración</li><li>Compromiso</li><li>Confianza</li><li>Constancia</li><li>Cooperación</li><li>Creatividad</li><li>Curiosidad</li><li>Disciplina</li><li>Flexibilidad</li></ul>

<ul style="list-style-type: none"> <li>• construcción de moléculas</li> <li>• Representación y manipulación de estructuras moleculares en 2D</li> <li>• Representación y manipulación de estructuras moleculares en 3D</li> <li>• Programas para procesamiento de datos analíticos</li> <li>• Bases de datos de información química <ul style="list-style-type: none"> <li>• Conceptos básicos</li> <li>• Bases de datos de acceso abierto</li> <li>• Bases de datos de acceso restringido</li> <li>• Revistas electrónicas de acceso abierto</li> <li>• Revistas electrónicas de acceso restringido</li> <li>• Búsqueda bibliográfica especializada</li> </ul> </li> <li>• Química computacional y modelado molecular <ul style="list-style-type: none"> <li>• Conceptos básicos</li> <li>• Mecánica Molecular</li> <li>• Métodos de Estructura Electrónica</li> <li>• Modelado Molecular</li> </ul> </li> </ul> <p>Aplicaciones</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Construcción de soluciones alternativas.</li> <li>• Descripción</li> <li>• Discriminación de ideas</li> <li>• Elaboración de fichas</li> <li>• Elaboración de mapas conceptuales</li> <li>• Juicio</li> <li>• Manejo de paquetería básica de Office (Word, Power Point, Excel, correo electrónico, chat, navegador)</li> <li>• Organización de información</li> <li>• Reconocimiento de códigos no verbales</li> <li>• Síntesis</li> <li>• Toma de decisiones</li> <li>• Transferencia</li> <li>• Validación</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Honestidad</li> <li>• Imaginación</li> <li>• Iniciativa</li> <li>• Interés cognitivo</li> <li>• Interés por la reflexión</li> <li>• Liderazgo</li> <li>• Perseverancia</li> <li>• Respeto</li> <li>• Respeto intelectual</li> <li>• Responsabilidad</li> <li>• Seguridad</li> <li>• Sensibilidad</li> <li>• Solidaridad</li> <li>• Tenacidad</li> <li>• Tolerancia</li> <li>• Tolerancia a la frustración</li> </ul>
---	--	---

#### 24.-Estrategias metodológicas

De aprendizaje	De enseñanza
Búsqueda de fuentes de información Lectura, síntesis e interpretación Procedimientos de interrogación Mapas conceptuales Imitación de modelos Repetición simple y acumulativa Consulta en fuentes de información Clasificaciones Analogías Metáforas Investigaciones Preguntas intercaladas Discusiones grupales Visualizaciones	Discusión dirigida Exposición con apoyo tecnológico variado Lectura comentada Objetivos o propósitos del aprendizaje Seminarios Debates Simulaciones Ilustraciones Resúmenes

#### 25.-Apoyos educativos

Materiales didácticos	Recursos didácticos
Diapositivas Tutoriales Programas de cómputo Libros Antologías	Proyector Computadora con conexión a internet Programas de cómputo Pintarrón y marcadores para usos varios

Artículos de revistas especializadas Audiovisuales Fotocopias Páginas web Lecturas relacionadas con los problemas	
---	--

### 26.-Evaluación del desempeño

Evidencia(s) de desempeño	Criterios de desempeño	Ámbito (s) de aplicación	Porcentaje
Elaboración de esquemas de procesos químicos empleando software especializado en química.	Claridad Congruencia Puntualidad Suficiencia	Aula	15
Elaboración de un reporte escrito sobre un tema seleccionado por el estudiante, utilizando bases de datos de acceso público.	Claridad Coherencia Congruencia Honestidad Puntualidad Suficiencia	Aula	15
Elaboración de un reporte escrito sobre un tema seleccionado por el estudiante, utilizando bases de datos de acceso restringido.	Claridad Coherencia Congruencia Honestidad Puntualidad Suficiencia	Aula	15
Desarrollo de un estudio de modelado molecular a nivel de Mecánica Molecular, sobre un sistema químico propuesto por el estudiante.	Claridad Coherencia Congruencia Honestidad Suficiencia Oportunidad	Aula	25
Elaboración de un artículo científico	Claridad Coherencia Congruencia Honestidad Puntualidad Suficiencia Pertinencia Oportunidad	Aula	30
Total			100%

### 27.-Acreditación

Para acreditar esta EE el estudiante deberá presentar con suficiencia cada una de las evidencias de desempeño, es decir, deberá alcanzar al menos un 60% en cada una de las mismas, así como cubrir el 80% de las asistencias.

## 28.-Fuentes de información

### Básicas

- Gasteiger, J.; Engel, T. (2003). *Chemoinformatics: A Textbook*, Wiley-VCH, Weinheim, Alemania.
- Leach, A. R.; Gillet, V. J. (2007). *An Introduction to Chemoinformatics*, Springer, Países Bajos.
- Bunin, B. A.; Bajorath, J.; Siesel, B.; Morales, G. (2007). *Chemoinformatics. Theory, Practice and Products*, Springer, Países Bajos.
- Andrés, J.; Beltrán, J. (2000). *Química Teórica y Computacional*, Publicaciones de la Universitat Jaume I, España.
- Holtje, H. D.; Folkers, G. (1997). *Molecular Modeling. Basic Principles and Applications*, VCH Publishers, New York.
- Hinchliffe, A. (2009). *Molecular Modelling for Beginners*, Wiley, Estados Unidos.
- Nicolás Vázquez, M. I.; Marín Chiñas, E.; Castro Martínez, F. M.; Miranda Ruvalcaba, R. (2006). *Algunos Aspectos Básicos de la Química Computacional*, UNAM, México.

### Complementarias

- Brown, F. K. (1998). "Chemoinformatics: What Is It and How Does It Impact Drug Discovery?" *Annual Reports in Medicinal Chemistry* 33, 375–382.
- Schofield, H.; Wiggins, G.; Willett, P. (2001). "Recent Developments in Chemoinformatics Education." *Drug Discovery Today* 6, 931–934.
- Warr, W. A. (1999). "Balancing the Needs of the Recruiters and the Aims of the Educators." 218th ACS National Meeting, New Orleans, LA, August 22–26, 1999. Washington, DC, Wendy Warr & Associates.
- Todeschini, R.; Consonni V. (2009). *Molecular Descriptors for Chemoinformatics*, Wiley-VCH, Weinheim, Alemania.
- Lewars, E. G. (2011). *Computational Chemistry*, Springer, New York.
- Cuevas, G.; Cortés, F. (2003). *Introducción a la Química Computacional*, Fondo de Cultura Económica, México.
- *Journal of Chemical Information and Modeling*. American Chemical Society Publications, Estados Unidos.
- *Journal of Chemical Theory and Computation*. American Chemical Society Publications, Estados Unidos.
- *Journal of Medicinal Chemistry*. American Chemical Society Publications, Estados Unidos.
- *Journal of Chemoinformatics*. Springer, Estados Unidos.