



Programa de estudios de experiencia educativa

1.-Área académica

Área Académica Técnica

2.-Programa educativo

Ingeniería en Biotecnología

3.-Campus

Orizaba y Coatzacoalcos

4.-Dependencia/Entidad

Facultad de Ciencias Químicas

5.-Código	6.-Nombre de la experiencia educativa	7.-Área de formación	
		Principal	Secundaria
IBIA 18013	Diseño y modelado de bioprocesos	D	No aplica

8.-Valores de la experiencia educativa

Créditos	Teoría	Práctica	Total de horas	Equivalencia(s)
3	0	3	45	Ninguna

9.-Modalidad

10.Oportunidades de evaluación

Taller	AGJ=Cursativa
--------	---------------

11.-Requisitos

Prerrequisitos	Correquisitos
Ninguna	Ninguno

12.-Características del proceso de enseñanza aprendizaje

Individual/Grupal	Máximo	Mínimo
Grupal	40	10



13.-Agrupación natural de la experiencia educativa

14.-Proyecto integrador

Ingeniería aplicada	No aplica
---------------------	-----------

15.-Fecha

Elaboración	Modificación	Aprobación
Enero 2020	---	Junio 2020

16.-Nombre de los académicos que participaron

Dra. Sharon Rosete Luna, Dr. Rafael Uzárraga Salazar

17.-Perfil docente

Químico Farmacéutico Biólogo, de preferencia con posgrado, con 2 años de experiencia docente y 2 años de experiencia profesional en química computacional.

18.-Espacio

19.-Relación disciplinaria

Intraprograma educativo	Multidisciplinario
-------------------------	--------------------

20.-Descripción

Esta experiencia educativa se localiza en el área de formación disciplinar, cuenta con 3 h prácticas y 3 créditos. Su propósito es que el estudiante aplique las metodologías computacionales para el modelado de biomoléculas y fármacos, estableciendo la relación estructura-actividad, para el desarrollo de la EE se proponen estrategias metodológicas basadas en la implementación de habilidades de razonamiento crítico y pensamiento científico, búsqueda de información y trabajo en equipo. Por lo tanto, el desempeño de la unidad de competencia se evidencia en forma integral tomando en cuenta la discusión de artículos de divulgación científica, tareas, exámenes y un proyecto de investigación.

21.-Justificación

La biotecnología es un campo muy dinámico y en constante desarrollo, innovación y actualización con la finalidad de proponer soluciones y alternativas en las diversas problemáticas mundiales del sector salud, alimentario, ambiental, entre otros. Por ello, la experiencia educativa de diseño y modelado de bioprocessos le permitirá al egresado de Ingeniería en biotecnología abordar dichas problemáticas con herramientas computacionales de frontera gracias al uso de softwares especializados para que sea capaz de realizar el modelado molecular de biomoléculas y con ello tener un mayor alcance en la toma de decisiones.



22.-Unidad de competencia

El estudiante aplica los conocimientos de modelado molecular utilizando los métodos computacionales para que establezca las principales interacciones responsables de unión enzima-ligando, haciendo búsqueda de los sitios activos de biomoléculas, así como las relaciones estructura actividad y el acoplamiento molecular automatizado basado en la mecánica molecular, con el fin de entender las principales funciones de las biomoléculas a nivel molecular con autonomía, creatividad y tolerancia.

23.-Articulación de los ejes

Los alumnos reflexionan, individualmente y en equipo, en un marco de orden y respeto mutuo, sobre el modelado molecular interpretando los resultados del trabajo realizado de forma escrita y práctica, identificando los valores que les permiten interactuar en beneficio de sí mismo, de su grupo y de la sociedad. Finalmente discuten y exponen en equipo sus resultados.

24.-Saberes

Teóricos	Heurísticos	Axiológicos
<p>Introducción Estabilidad de las biomoléculas. Los bioprocesos desde el punto de vista molecular. Principales biomoléculas</p> <p>Química Supramolecular Introducción Enzima-ligando Enzima-Sustrato Preorganización y complementariedad geométrica Selectividad termodinámica y cinética Interacciones intermoleculares Reconocimiento molecular Autoensamblaje y efecto plantilla</p>	<ul style="list-style-type: none"> Reconoce la actividad biológica de algunas biomoléculas, así como las reacciones químicas y bioquímicas necesarias para que una célula lleva a cabo su función Entiende conceptos básicos de la química supramolecular, conoce el modelo llave-cerradura e identifica la importancia del reconocimiento molecular en los sistemas biológicos, así como la construcción de los ensambles biomoleculares. Comprende la diferencia de los métodos computacionales para la optimización molecular 	<ul style="list-style-type: none"> Apertura a la opinión de los compañeros. Autonomía en las actividades extra clase. Compromiso en el trabajo colaborativo. Disposición para la colaboración. Respeto hacia sus compañeros. Tolerancia a las ideas u opiniones. Honestidad en el trabajo en equipo.



<p>Introducción a la química computacional</p> <p>Fundamentos</p> <p>Mecánica molecular</p> <p>Cálculos semiempíricos</p> <p>Cálculos Ab initio</p> <p>Teoría de los funcionales de la densidad (DFT)</p> <p>Modelado molecular</p> <p>Introducción</p> <p>Conceptos básicos</p> <p>Determinación de los mínimos energéticos de biomoléculas</p> <p>Determinación de propiedades físicas de las biomoléculas</p> <p>Diseño computacional</p> <p>Introducción</p> <p>Bases de datos: Bibliotecas de compuestos bioactivos</p> <p>Relaciones cuantitativas estructura-actividad</p> <p>Acomplamiento molecular automatizado (Docking)</p>	<p>basada en la mecánica molecular y la mecánica cuántica.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Comprende la importancia y principales aplicaciones del modelado molecular asistido por computadora para ayudar a resolver problemas químicos como son la disposición espacial de los átomos en las biomoléculas. • Comprende y analiza los conceptos básicos de bioinformática, siendo capaces de manejar e interpretar técnicas computacionales asociadas en el descubrimiento, diseño y desarrollo de compuestos bioactivos. 	
--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--

25.-Estrategias metodológicas

De aprendizaje	De enseñanza
<ul style="list-style-type: none"> • Investigación documental • Lectura e interpretación de textos especializados • Bitácora • Experimentos • Prácticas de laboratorio 	<ul style="list-style-type: none"> • Atención a dudas y comentarios • Explicación de procedimientos • Dirección de prácticas • Planteamiento de preguntas guía • Organización de grupos • Supervisión de trabajos



26.-Apoyos educativos

Materiales didácticos	Recursos didácticos
<ul style="list-style-type: none"> • Artículos científicos • Bases de datos • Libros • Manual de prácticas de laboratorio • Videos 	<ul style="list-style-type: none"> • Computadora • Material de laboratorio • Equipo de laboratorio • Pintarron • Proyector

27.-Evaluación del desempeño

Evidencia(s) de desempeño	Criterios de desempeño	Ámbito(s) de aplicación	Porcentaje
Discusión de artículos	<ul style="list-style-type: none"> • Comprensión y exposición 	Aula	20 %
Tareas	<ul style="list-style-type: none"> • Entregar en tiempo y forma 	Extraclasses	20 %
Exámenes	<ul style="list-style-type: none"> • Responder correctamente 	Aula	40 %
Proyecto de investigación	<ul style="list-style-type: none"> • Cumplir con los requisitos establecidos 	Aula	20 %

28.-Acreditación

Para acreditar esta EE el estudiante deberá haber presentado con idoneidad y pertinencia cada evidencia de desempeño, es decir, que en cada una de ellas haya obtenido cuando menos el 60%, además de cumplir el porcentaje de asistencia establecido en el estatuto de alumnos 2008.

29.-Fuentes de información

Básicas
<ul style="list-style-type: none"> • Leach A. R. (2001) Molecular Modelling Principle and applications, Ed. Prentice Hall. • Lehn J.M., (1995). Supramolecular Chemistry-Concepts and Perspectives, VCH, Weinheim, ch. 9. • Lewars E. (2016). Computational Chemistry, Introduction to the theory and applications of molecular and Quantum Mechanics, 3a ed., Springer. • Jensen F. (2017). Introduction of Computational Chemistry, 3a Ed., Ed. Wiley. • Schneider H.G. (2012). Applications of Supramolecular Chemistry, CRC Press. • Steed J. W, Atwood J. L., (2009). Supramolecular Chemistry, Wiley & Sons., England, 2a. edición.



Complementarias

- Biblioteca virtual
- Chen, W.L. (2006). Chemoinformatics: Past, present, and future. *J. Chem. Inf. Model.*, , 46:2230-2255
- Fauchère J-K (1989). QSAR: Quantitative structure-activity relationships in drug design,
- Gasteiger, J (2016). Chemoinformatics: Achievements and Challenges, a Personal View, *Molecules*, , 21:151
- Gupta S. P. (2006). QSAR and molecular modeling studies in heterocyclic drugs, , Ed Springer-Verlag,