



Universidad Veracruzana

Dirección General de Desarrollo Académico e Innovación Educativa
Dirección de Innovación Educativa / Departamento de Desarrollo Curricular
Programa de experiencia educativa
Opción Profesional Químico Farmacéutico Biólogo 2020

1. Área Académica

Área Académica Técnica

2. Programa Educativo

Químico Farmacéutico Biólogo

3. Entidad(es) Académica(s)	4. Región(es)
<ul style="list-style-type: none">Facultad de Química Farmacéutica BiológicaFacultad de Ciencias Químicas	<ul style="list-style-type: none">XalapaOrizaba-Córdoba

5. Código	6. Nombre de la Experiencia Educativa
QFQU 18012	Química Computacional

7. Área de Formación del Modelo Educativo Institucional	8. Carácter
Área de Formación Terminal	Optativa

9. Agrupación curricular distintiva
Academia de Química

10. Valores

Horas Teóricas	Horas Prácticas	Horas Otras	Total de horas	Créditos	Equivalencia (s)
3	0	0	45	6	Ninguna

11. Modalidad y ambiente de aprendizaje

12. Espacio

13. Relación disciplinaria

14. Oportunidades de evaluación

M: Taller	A: Híbrido	IPA = Intraprograma educativo	Interdisciplinar	Ordinario
--------------	---------------	----------------------------------	------------------	-----------

15. EE prerequisito(s)

No Aplica

16. Organización de los estudiantes en el proceso de aprendizaje

Máximo	Mínimo
30	5

17. Justificación articulada a la Fundamentación del plan de estudios

La experiencia educativa de Química Computacional es de gran importancia para las/los estudiantes del PE Químico Farmacéutico Biólogo en el AFT Optativa; ya que con esta experiencia educativa las/los estudiantes aplicarán cálculos computacionales para predecir propiedades químicas de las moléculas; proponiendo así dar solución a problemas químicos experimentales en el diseño de moléculas orgánicas de importancia industrial, como son los fármacos, pinturas, pesticidas, etc. Los conocimientos, habilidades y aptitudes promovidas en esta EE, proporcionarán las bases para una práctica profesional del químico farmacéutico biólogo creativa en el área de la química. Para acreditar esta EE, se realizará en forma integral tomando en cuenta la participación asertiva, exámenes escritos, tareas entregadas en tiempo y forma, exposición de artículos de divulgación científica. Las/los estudiantes conseguirán una postura crítica y reflexiva que les permitirá interpretar diversos contextos ecológicos-culturales ocurridos o actuales con ética, respeto y responsabilidad social.

18. Unidad de competencia (UC)

La/el estudiante aplica cálculos computacionales idóneos basados en mecánica cuántica y mecánica molecular, para predecir propiedades químicas de las moléculas que son de interés en el área de la industria farmacéutica, química, alimentos, cosmética entre otras, utilizando conocimientos básicos de química. A través de la comprensión y razonamiento apropiado para la preparación de moléculas orgánicas de interés biológico y/o comercial, en un ambiente de responsabilidad, tolerancia y aprendizaje colaborativo.

19. Saberes

Heurísticos	Teóricos	Axiológicos
<ul style="list-style-type: none"> • Reconocimiento de los fundamentos de los cálculos computacionales, así como sus ventajas y desventajas. • Identificación de la diferencia de los métodos computacionales para la optimización molecular basada en la mecánica molecular y la mecánica cuántica. • Comprensión de la importancia y principales 	<p>Introducción a los cálculos teóricos.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Fundamento • Introducción a las diferentes teorías para calcular sistemas moleculares. • Ventajas y desventajas de cada nivel de teoría. • Ventajas y desventajas de software gratuito y de licencia. <p>Clasificación de los cálculos computacionales</p> <ul style="list-style-type: none"> • Mecánica molecular • Introducción, Fundamentos y aplicaciones. • Moléculas poliatómicas 	<ul style="list-style-type: none"> • Demuestra honestidad en las evidencias de desempeño • Trabaja con constancia en el trabajo diario • Tiene autonomía en las actividades extraclasses • Demuestra compromiso en el trabajo colaborativo • Muestra apertura y respeto a las ideas y opiniones de los compañeros

<p>aplicaciones de la química computacional, para la resolución de problemas químicos como son la geometría, propiedades químicas, reactividad y espectros de emisión.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Analiza las propiedades químicas de las moléculas eligiendo un método computacional idóneo para su determinación. 	<ul style="list-style-type: none"> • Energías que componen a un campo de fuerza • Semiempíricos • Introducción • Campo de fuerza PM3,PM6 y PM7 • Aplicaciones <p>Teoría del funcional de la densidad.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Introducción • Densidad electrónica • Métodos DFT • Aplicaciones • Ab initio • Introducción • Ecuación de Schrondinger • Solución del átomo de hidrógeno • Aplicaciones <p>Modelado molecular</p> <ul style="list-style-type: none"> • Conceptos básicos • Geometría molecular • Reactividad química • Espectros de IR • Espectros de UV/vis • Espectros ^1H y ^{13}C • Propiedades químicas • Ejercicios de aplicación <p>Problemas de aplicación</p> <ul style="list-style-type: none"> • Distancia de enlace • Ángulos de enlace • Momento dipolar • Reactividad • Interacciones intermoleculares • Orbitales moleculares 	
--	---	--

20. Estrategias generales para el abordaje de los saberes y la generación de experiencia

	(x) Actividad presencial	(x) Actividad virtual o ()En línea
De aprendizaje	<ul style="list-style-type: none"> • Exposición con apoyo tecnológico variado. • Discusión de problemas • Aprendizaje basado en problemas (ABPs). • Discusión de problemas • Aprendizaje cooperativo. 	<ul style="list-style-type: none"> • Investigación documental. • Lectura e interpretación de textos. • Aprendizaje autónomo • Aprendizaje basado en problemas (ABPs)
De enseñanza	<ul style="list-style-type: none"> • Atención a dudas y comentarios. • Explicación de procedimientos. • Organización de grupos. • Supervisión de trabajos. 	<ul style="list-style-type: none"> • Recuperación de saberes previos. • Asignación de tareas. • Organización de grupos. • Supervisión de trabajos.

21. Apoyos educativos.

Libros, Software, Páginas web, Presentaciones, Manual, Proyector/cañón, Pizarrón, Computadoras

La planeación de los aprendizajes de la experiencia educativa deberá desarrollar las rutas o secuencias de aprendizaje, explicitando los aspectos declarados en el programa de experiencia educativa como justificación, unidad de competencia, saberes, estrategias de enseñanza y aprendizaje, apoyos educativos, evidencias de desempeño y procedimiento de evaluación; acorde con el MEIF. La planeación de los aprendizajes se deberá validar y entregar a las instancias correspondientes (Aval de academia, Dirección de Facultad y Dirección General de Área Académica Técnica) previo a su impartición y presentar al estudiante al inicio del periodo escolar en complemento al Programa de Experiencia Educativa.

22. Evaluación integral del aprendizaje.

Evidencias de desempeño por productos	Indicadores generales de desempeño	Procedimiento de evaluación	Porcentaje
Exámenes	<ul style="list-style-type: none"> • Suficiencia • Pertinencia • Congruencia • Claridad • Ortografía 	Técnica: Examen escrito Instrumento: Clave de examen	70 %
Actividades	<ul style="list-style-type: none"> • Suficiencia • Pertinencia • Congruencia • Calidad • Ortografía 	Técnica: Portafolio de evidencias Instrumento: Rúbrica	20 %

	<ul style="list-style-type: none"> • Puntualidad de entrega 		
Trabajo integrador	<ul style="list-style-type: none"> • Suficiencia • Pertinencia • Creatividad • Calidad • Puntualidad de entrega 	Técnica: Evidencia Integradora Instrumento: Lista de Rúbrica	5 %
Evidencias de desempeño por demostración	Indicadores generales de desempeño	Procedimiento de evaluación	Porcentaje
Exposición de trabajo integrador	<ul style="list-style-type: none"> • Calidad • Suficiencia • Claridad • Presentación 	Técnica: Observación directa Instrumento: Guía de observación	5 %
			Porcentaje total: 100%

23. Acreditación de la EE

Para acreditar, el/la estudiante deberá cumplir con el 80% de asistencia al curso, y con al menos 60% en las evidencias de desempeño, de acuerdo con el estatuto de alumnos 2008.

24. Perfil académico del docente

Licenciatura en Químico Farmacéutico Biólogo, Química o Químico Industrial; con Maestría y/o Doctorado en Química, Química Bioorgánica, Química Orgánica, Ciencias Químicas, Ciencias Quimicobiológicas; preferentemente con experiencia profesional y/o de investigación en el ámbito de la experiencia educativa; con experiencia docente en Instituciones de Educación Superior.

25. Fuentes de información

- Andrew R. (2001), Leach Molecular Modeling Principle and applications, Ed Prentice Hall.
- Errol Lewars, (2016), Computational Chemistry, Introduction to the theory and applications of molecular and Quantum Mechanics, 3a. ed., Springer
- Frank Jensen, (2017) Introduction of Computational Chemistry, 3ra ed., Ed. Wiley.
- Warren J. Hehre, (2013) A Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations, , Ed. Wavefuntion,.
- Biblioteca virtual UV: <http://www.uv.mx/bvirtual/>
- Chemn W.L. (2006), Chemoinformatics: Past, present and future. J. Chem. Inf. Model.
- Gasteiger, J (2016), Chemoinformatics: Achievements and Challenges, a Personal View, Molecules, 21:151

26. Formalización de la EE

Fecha de elaboración	Fecha de modificación	Cuerpo colegiado de aprobación
Enero 2020	Julio 2025	Junta Académica

27. Nombre de los académicos que elaboraron/modificaron

Dra. Sharon Rosete Luna, Dra. Delia Hernández Romero, Dra. Esmeralda Sánchez Pavón, M.C.
María Elizabeth Márquez López, Dr. Raúl Colorado Peralta, Rodolfo Peña Rodríguez.