1. **INFORMACIÓN GENERAL DEL CURSO**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Facultad** | Ciencias Bàsicas | **Fecha de Actualización** |  |
| **Programa** | Química | **Semestre** | 4 |
| **Nombre**  | Informática Química | **Código** | 23509 |
| **Prerrequisitos** |  | **Créditos** | 3 |
| **Nivel de Formación** | Técnico  |  | Profesional  | X | Maestría  |  |
| Tecnológico |  | Especialización  |  | Doctorado  |  |
| **Área de Formación**  | Básica |  | Profesional o Disciplinar | X | Electiva |  |
| **Tipo de Curso** | Teórico |  | Práctico |  | Teórico-práctico | X |
| **Modalidad** | Presencial | X | Virtual |  | Mixta |  |
| **Horas de Acompañamiento Directo** | Presencial | 48 | Virtual |  | **Horas de Trabajo Independiente** | 96 |

1. **DESCRIPCIÓN DEL CURSO**

|  |
| --- |
| El curso de informática química se compone de cinco unidades, las cuales le permitirán al estudiante de  |
| química desarrollar o emplear distintas herramientas informáticas que le posibilitará resolver problemas  |
| relacionados con su área del conocimiento donde deba obtener información relevante, visualizar  |
| estructuras, emplear bases de datos, realizar representaciones moleculares e incluso cálculos químicos  |
| para sistemas atómicos o moleculares. |

1. **JUSTIFICACIÓN DEL CURSO**

|  |
| --- |
| El estudiante adquiere las competencias necesarias para reconocer variables de distintos sistemas del |
| ámbito químico y plantee las estrategias informáticas necesarias que le permitan dar solución al mismo. |
|  |
|  |

1. **PRÓPOSITO GENERAL DEL CURSO**

|  |
| --- |
| Conocer y aplicar herramientas básicas de informática y programación que permitan la resolución de |
| Problemas que implique el manejo de información química. |
|  |
|  |

1. **COMPETENCIA GENERAL DEL CURSO**

|  |
| --- |
| Utilizar software específicos que faciliten la adquisición y tratamiento de datos de importancia química |
| Gestionar información química de calidad, a través, de los recursos que ofrece la web |
|  |
|  |

**6. PLANEACIÓN DE LAS UNIDADES DE FORMACIÓN**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **UNIDAD 1.** | Sistemas Informáticos | **COMPETENCIA** | Utilizar diferentes sistemas operativos, de acuerdo con las fortalezas de cada uno y la aplicación química requerida.  |
| **CONTENIDOS** | **ESTRATEGIA DIDÁCTICA** | **INDICADORES DE LOGROS** | **CRITERIOS DE EVALUACIÓN** | **SEMANA** |
| Hardware y Software | Clases magistrales con seminarios sobre hardware y software empleando como presentador power point. | Conoce, comprende y evalúa la estructura y arquitectura de los computadores así como los componentes que lo conforman.. | Cumplimiento de compromisos tales como Presentación de seminario. | 1  |
| Sistemas Operativos | Lecturas dirigidas con visita a diferentes sitios web , con exposición empleando como presentador prezi. | Reconoce estructura, fortalezas y debilidades de sistemas operativos Windows, Unix, Linux y Apple. | Cumplimiento de compromisos tales como Presentación de seminario. | 2 |
| Sistemas Linux: Instalación Ubuntu | Estudio de caso sobre instalación de S.O y presentación de conclusiones a través de pow-toon | Instala sistema operativo Linux (Ubuntu) empleando maquinas virtuales o arranque dual | Presentación de pow-toon sobre sistema Ubuntu.Instalación de Sistema Linux | 3 |
|  Empleo de Linux | Clase demostrativa sobre uso de comandos empleando la interfaz de webminal | Emplea diferentes comandos que le permiten navegar bajo un sistema con entorno Linux | Resolución de ejercicios Linux bajo modo consola. | 4 |
|  |  |  |  |  |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **UNIDAD 2.** | Algoritmia y programación | **COMPETENCIA** | Emplear conocimientos básicos de algoritmia y programación en python para desarrollar aplicaciones sencillas del ámbito químico. |
| **CONTENIDOS** | **ESTRATEGIA DIDÁCTICA** | **INDICADORES DE LOGROS** | **CRITERIOS DE EVALUACIÓN** | **SEMANA** |
| Lenguajes de Programación | Lectura dirigida sobre lenguajes de programación, análisis y discusión de elementos estructurales de los mismos | Aplica lógica computacional para el análisis de problemas en lenguajes de programación estructurada | Quiz y Discusión de material bibliográfico | 5 |
| Diagramas de flujo | Clase magistral y ejercicios de lectura de diagramas de flujo | Elabora diagramas de flujo estructurados que permiten la resolución de tareas | Presentación de diagramas de flujo de ejercicios planteados | 5 |
| Instalación de Python, IDE | Estudio de caso sobre instalación de python e IDE | Instala python en diferentes sistemas operativos | Presentación de python instalado en desktop o laptop con diferentes S.O | 6 |
| Introducción a python: Variables, expresiones y sentencias, ejecución condicionales  | Clase magistral y realización de ejercicios modelo de programación bajo entorno python. | Usa algunos elementos de programación en python tales como variables, sentencias y condicionales como and, or, if,else, elif en programas sencillos | Desarrollo de proyectos de programación con un lenguaje de alto nivel (python)  | 6 |
| Funciones, iteración y cadenas | Emplea funciones, iteraciones y cadenas al construir programas en lenguaje python. | 7 |
| Ficheros, listas y diccionarios | Emplea ficheros, listas y diccionarios al construir programas en lenguaje python | 7 |
|  |  |  |  |  |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **UNIDAD 3.** | Bases de datos | **COMPETENCIA** | Manejar bases de datos en la búsqueda de información de interés químico. |
| **CONTENIDOS** | **ESTRATEGIA DIDÁCTICA** | **INDICADORES DE LOGROS** | **CRITERIOS DE EVALUACIÓN** | **SEMANA** |
| Bases de información Bibliográficas | Visita guiada de páginas web donde se anidan bases de datos, analizando estructura y técnicas para extraer información de tipo bibliográfico, estructuras químicas o datos de interés  | Gestiona en bancos de información bibliográfica datos relevantes de interés que usa para construir cuerpos teóricos. | Utiliza bases de datos para realizar review sobre temas de interés químico, citándolas correctamente. | 8 |
| Bases de datos estructurales y cristalográficas | Gestiona en bases de datos estructurales y cristalográficos información relativa a sustancias químicas de interés | 9 |
| PDB | Lee ficheros PDB y extrae información de los mismos | 10 |
| AMDIS | Visitar páginas web y descarga de base datos de NIST compilada en entorno grafico de AMDIS | Usa AMDIS para extraer información de propiedades y parámetros fisicoquímicos para moléculas de trabajo | Obtiene información de simulación de cromatografías, picos base, nombres I.U.P.A.C patrones de fragmentación etc a partir de AMDIS. | 10 |
|  |  |  |  |  |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **UNIDAD 4.** | Herramientas de Visualización y edición molecular | **COMPETENCIA** | Usar e instalar herramientas de visualización y edición molecular como elementos iniciales que permiten la simulación y modelamiento molecular. |
| **CONTENIDOS** | **ESTRATEGIA DIDÁCTICA** | **INDICADORES DE LOGROS** | **CRITERIOS DE EVALUACIÓN** | **SEMANA** |
| ACD-labs | Seminario sobre dibujo de estructuras químicas 2D empleando shareware ACD-lab | Conoce detalles técnicos de instalación y operación del shareware ACD-labs en la representación de estructuras químicas en 2D | Trabajo individual de representación de moléculas 2D empleando ACD-lab. | 11 |
| VMD | Visitar páginas web y lectura guiada de manuales de uso de visualizadores, a través de ejercicios modelo | Conoce detalles técnicos de instalación y operación del visualizador de biomoléculas VMD | Resolución de ejercicios de visualización empleando diferentes paquetes computacionales. | 12 |
| Jmol | Conoce detalles técnicos de uso del visualizador de sistemas químicos Jmol | 12 |
| Pymol | Conoce detalles técnicos de instalación y operación de pymol en bioinformática. | 13 |
| Mercury | Emplea detalles técnicos de instalación y operación del visualizador de patrones de difracción de rayo X Mercury. | 13 |
|  |  |  |  |  |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **UNIDAD 5.** | Software de cálculo de propiedades químicas | **COMPETENCIA** | Emplear distintos software que corren bajo de diferentes sistemas operativos en el cálculo de algunas propiedades químicas. |
| **CONTENIDOS** | **ESTRATEGIA DIDÁCTICA** | **INDICADORES DE LOGROS** | **CRITERIOS DE EVALUACIÓN** | **SEMANA** |
| Avogadro | Clase magistral, e instalación a desde sitio web o repositorio según sistema operativo con ejercicios en moléculas. | Instala y usa algunos paquetes químicos tales como Avogadro, Ghemical y Gamess para calcular algunas propiedades química | Usa el software Avogadro para obtener información de interés fisicoquímico de moléculas problema.  | 14 |
| Ghemical | Clase magistral, e instalación desde repositorio practica con ejercicios modelo. | Usa el software ghemical para obtener información de interés de moléculas problema. | 15 |
| Gamess | Seguimiento de protocolo de instalación y estudio de ficheros de entrada para realizar cálculos de optimización y energía de sistemas atómicos y moleculares. | Instala y usa el paquete gamess obteniendo información de optimización de parámetros y energía reconociendo detalles técnicos | 16 |
|  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |

1. **BIBLIOGRAFÍA BÁSICA DEL CURSO**

|  |
| --- |
| De Mora Buendia, C, *Estructura y tecnología de computadores*, Universidad Nacional de Educación a Distancia, 2002. |
| Serrat Olmos, M, A, *Ubuntu Linux*, Ra-Ma Editorial, S.A., 2009 |
| Coutinho Menezes , N, N, *Algoritmos y lógica de programación con python,* Novatec, 2016 |
| Warr, W *Chemical Information and Computation*, Wendy Warr & Associates, 2006 |

1. **BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA DEL CURSO**

|  |
| --- |
| Herraes, A , *Cómo utilizar Jmol para estudiar y presentar estructuras molecularas, 1 ed, 2007* |
| Bunin, B, A; Bajorath, J; Siesel, B; Morales G *Chemoinformatics theory, practice and products*, Springer 2007 |
| Eils, R; Kriete, A *Computational systems biology,* Academic Press, 2 ed, 2014 |
| N R, *General Atomic and Molecular Electronic Structure System: GAMESS User's Guide*, Department of Chemistry, North Dakota State University, 1987  |