



Programa de estudio de experiencia educativa

1. Área académica

Área Académica Técnica

2.-Programa educativo

Químico Farmacéutico Biólogo

3.- Campus

Xalapa y Orizaba-Córdoba

4.-Dependencia/Entidad

Facultad de Química Farmacéutica Biológica/Ciencias Químicas

5.- Código	6.-Nombre de la experiencia educativa	7.- Área de formación	
		Principal	Secundaria
QFBI 18019	Modelado de biomoléculas	T	AFEL

8.-Valores de la experiencia educativa

Créditos	Teoría	Práctica	Total horas	Equivalencia (s)
6	0	6	90	Ninguna

9.-Modalidad

Taller

10.-Oportunidades de evaluación

AGJ= Cursativa

11.-Requisitos

Pre-requisitos	Co-requisitos
Ninguno	Ninguno

12.-Características del proceso de enseñanza aprendizaje

Individual / Grupal	Máximo	Mínimo
Grupal	40	10



**13.-Agrupación natural de la
Experiencia educativa**

Academia de Biomédicas

14.-Proyecto integrador

Immunología y biología molecular aplicada

15.-Fecha

Elaboración	Modificación	Aprobación
Enero 2020	---	Junio 2020

16.-Nombre de los académicos que participaron

Los académicos pertenecientes a la Academia de Biomédicas de la región Xalapa y Orizaba - Córdoba

17.-Perfil del docente

Licenciatura en QFB, preferente con posgrado en el área

18.-Espacio

Interfacultades

19.-Relación disciplinaria

Interdisciplinario

20.-Descripción

Esta experiencia educativa se localiza en el AFT Optativa, cuenta con 0 horas teóricas, 6 horas prácticas y 6 créditos, que integran el plan de estudios 2020. Su propósito es que el estudiante aplique las metodologías computacionales para el modelado de biomoléculas y fármacos, estableciendo la relación estructura-actividad, para su desarrollo se proponen estrategias metodológicas basadas en la implementación de habilidades de razonamiento crítico y pensamiento científico, búsqueda de información, trabajo en equipo. Por lo tanto, el desempeño de la unidad de competencia se evidencia en forma integral, tomando en cuenta exámenes, discusión de artículos de divulgación científica, tareas y un proyecto de investigación.

21.-Justificación

Esta experiencia educativa permite al Químico Farmacéutico Biólogo aplicar metodologías computacionales para el análisis conformacional de diversos compuestos químicos con actividad biológica y estudiar las principales interacciones intermoleculares responsables de unión con el blanco terapéutico. Estos conocimientos le permitirán desarrollar soluciones a las diversas problemáticas en el área de biofarmacéutica, con una actitud de servicio, responsabilidad y honestidad.
--



22.-Unidad de competencia

El estudiante aplica los conocimientos de modelado molecular utilizando los métodos computacionales, estableciendo las principales interacciones intermoleculares responsables de la unión fármaco-receptor, haciendo una 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 los conocimientos de actividad de las biomoléculas, haciendo la búsqueda de sitios activos para interacciones de interés, realizando ejercicios de aplicación e interpretando los resultados de forma escrita y práctica con responsabilidad y honestidad. Finalmente discuten en equipo sus resultados.

24.-Saberes

Teóricos	Heurísticos	Axiológicos
<p>INTRODUCCIÓN</p> <ul style="list-style-type: none"> * Estabilidad de biomoléculas * Los bioprocesos desde el punto de vista molecular * Principales biomoléculas. <p>QUÍMICA SUPRAMOLECULAR</p> <ul style="list-style-type: none"> * Fundamentos * Anfitrión-huésped * Preorganización y complementariedad * Selectividad termodinámica y cinética * Interacciones intermoleculares * Reconocimiento molecular de: <ul style="list-style-type: none"> Cationes Aniones Moléculas neutras * Autoensamblaje y efecto plantilla 	<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 lleve 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 en la construcción de ensamblajes biomoleculares. 	<ul style="list-style-type: none"> • Responsabilidad cognitiva • Seguridad y cuidado • Apertura al dialogo • Colaboración responsable • Autocrítica cognitiva • Compromiso ético • Constancia en las actividades • Disposición al trabajo colaborativo • Respeto a las opiniones



<p>INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA COMPUTACIONAL</p> <ul style="list-style-type: none"> * Fundamentos * Mecánica molecular * Cálculos semiempíricos * Cálculos Ab initio * Teoría de los funcionales de la densidad (DFT) <p>MODELADO MOLECULAR</p> <ul style="list-style-type: none"> * Introducción * Conceptos básicos * Determinación de los mínimos energéticos de biomoléculas * Determinación de propiedades físicas de las biomoléculas <p>DISEÑO COMPUTACIONAL</p> <ul style="list-style-type: none"> * Introducción * Bases de datos: Bibliotecas de compuestos bioactivos * Espacio químico * Relaciones cuantitativas estructura-actividad * Acomplamiento molecular automatizado (Docking) 	<ul style="list-style-type: none"> • Comprende la diferencia de los métodos computacionales para la optimización molecular basada en la mecánica cuántica y en la mecánica molecular. • 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"> • Exposición con apoyo tecnológico variado • Investigación documental • Reportes de lectura • Discusión de problemas • Aprendizaje basado en problemas (ABPs) • Aprendizaje basado en TIC • Modelaje • Simulación 	<ul style="list-style-type: none"> • Atención a dudas y comentarios • Explicación de procedimientos • Recuperación de saberes previos • Lectura comentada • Asesorías grupales • Discusión dirigida



<ul style="list-style-type: none"> • Lectura e interpretación de textos • Aprendizaje autónomo 	<ul style="list-style-type: none"> • Organización de grupos
--	--

26.-Apoyos educativos

Materiales didácticos	Recursos didácticos
<ul style="list-style-type: none"> • Software • Páginas web • Presentaciones 	<ul style="list-style-type: none"> • Proyector/cañón • Pizarrón • Computadoras

27.-Evaluación del desempeño

Evidencia (s) de desempeño	Criterios de desempeño	Ámbito(s) de aplicación	Porcentaje
Examen	Responder correctamente	Aula	40
Discusión de artículos	Comprensión y exposición	Aula	20
Tareas	Entregar en tiempo y forma	Extractase	20
Proyecto de investigación	Cumplir con 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"> • J. M. Lehn, (1995) Supramolecular Chemistry, Concepts and perspectives, VCH, Within. • J.W. Steed, J.L. Atwood, (2009) Supramolecular Chemistry, Wiley-Sons, England 2da. Ed. • H. G. Schneider, (2012) Applications of Supramolecular Chemistry, CRC Prees,. • Frank Jensen (2017), Introduction of Computational Chemistry, 3ra Ed., Ed. Wiley, • Errol Lewars (2016) Computational Chemistry, Introduction to the theory and applications of molecular and Quantum Mechanics, 3a. ed., Springer.



- Warren J. Hehre, (2013) A Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations, Ed. Wavefunction.
- Andrew R. Leach (2001), Molecular Modeling Principle and applications, , Ed Prentice Hall,.

Complementarias

- Biblioteca Virtual
- Chenm 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
- Gupta, S.P. (2006), QSAR and molecular modeling studies in heterocyclic drugs, , Ed Springer-Verlag.