



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
QFQU 18012	Química computacional	T	AFEL

8.-Valores de la experiencia educativa

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

9.-Modalidad

10.-Oportunidades de evaluación

Taller	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

14.-Proyecto integrador

Academia de Química	Síntesis, extracción y caracterización de nuevos productos químicos y sus aplicaciones. Síntesis y análisis estructural de sustancias con potencial actividad biológica.
---------------------	---

15.-Fecha

Elaboración	Modificación	Aprobación
Enero 2020	---	Junio 2020

16.-Nombre de los académicos que participaron

Los académicos pertenecientes a la Academia de Química 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 cálculos computacionales para predecir propiedades químicas de las moléculas, es indispensable para el estudiante ya que le permite dar solución a problemas químicos experimentales, 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 la discusión de artículos de divulgación científica, tareas, exámenes y un proyecto de investigación.

21.-Justificación

Esta experiencia educativa le permitirá al Químico Farmacéutico Biólogo aplicar cálculos computacionales idóneos basados en la mecánica cuántica y mecánica molecular, para predecir las 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. Estos conocimientos le permitirán al



estudiante proponer soluciones en las diversas problemáticas en el área de química, con una actitud de tolerancia, disciplina, creatividad y con el cuidado del ambiente.

22.-Unidad de competencia

El estudiante aplica conocimientos de química computacional para determinar la optimización molecular, sitios nucleofílicos y electrofílicos, determinación de espectros teóricos de IR, UV/Vis, RMN ¹H y ¹³C, utilizando los diferentes niveles de teoría de mecánica molecular y mecánica cuántica con el fin de entender las principales propiedades moleculares 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 química computacional de compuestos químicos 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 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</p> <p>- Mecánica Molecular</p> <ul style="list-style-type: none"> * Introducción * Fundamentos y aplicaciones * Moléculas poliatómicas * Energías que componen a un campo de fuerza <p>- Semiempíricos</p> <ul style="list-style-type: none"> * Introducción * Campo de fuerza * PM3, PM6 y PM7 * Aplicaciones 	<ul style="list-style-type: none"> • Conoce mis fundamentos de los cálculos computacionales, así como sus ventajas y desventajas • Comprende la diferencia de los métodos computacionales para la optimización molecular basada en la mecánica molecular y la mecánica cuántica. 	<ul style="list-style-type: none"> • 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>- Teoría del funcional de la densidad * Introducción * Densidad electrónica * Métodos DFT * Aplicaciones - Ab initio * Introducción * Ecuación de Schrodinger * Solución del átomo de hidrógeno * Aplicaciones -MODELADO MOLECULAR * Conceptos básicos * Geometría molecular * Reactividad química * Espectros de IR * Espectros UV/Vis * Espectros 1H y 13C * Propiedades químicas * Ejercicios de aplicación -PROBLEMAS DE APLICACIÓN * Distancias de enlace * Ángulos de enlace * Momento dipolar * Reactividad * Interacciones intermoleculares * Orbitales moleculares</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Comprende la importancia y principales aplicaciones de la química computacional, para ayudar a resolver problemas químicos como son la geometría, propiedades químicas, reactividad y espectros de emisión. • Analiza las propiedades químicas de las moléculas eligiendo un método computacional idóneo para su determinación 	
---	---	--

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 	<ul style="list-style-type: none"> • Atención a dudas y comentarios • Explicación de procedimientos • Recuperación de saberes previos • Lectura comentada • Asesorías grupales • Discusión dirigida • Organización de grupos



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

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"> • 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 Mehanics and Quantum Chemical Calculations, , Ed. Wavefuncton,.
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