

Código de asignatura: QI452

Nombre corto: Informática II

Nombre del programa académico	Química Industrial
Nombre completo de la asignatura	Informática II
Área académica o categoría	Fisicoquímica
Semestre y año de actualización	Semestre II - 2021
Semestre y año en que se imparte	Semestre IV - año 2
Tipo de asignatura	[X] Obligatoria [] Electiva
Número de créditos ECTS	4
Director o contacto del programa	Hoover Albeiro Valencia Sanchez
Coordinador o contacto de la asignatura	Hector Fabio Cortes Hernandez

Descripción y contenidos

1. Breve descripción

El curso de informática II se basa en la búsqueda de información en bases de datos y herramientas informáticas de diferentes temas transversales en la química, aplicación de funciones de Excel que mejoran el trabajo estadístico y solución numérica en ejercicios de química, aprender simulación molecular por software química cuántica computación y acoplamiento molecular en la explicación de propiedades de los compuestos químicos, y lenguaje básico de programación en Python para diseño básico de herramientas con aplicación en química. Además, el curso pretende fortalecer en el estudiante las bases del desarrollo científico, razonamiento cuantitativo y lectura crítica, que le permitan analizar, evaluar y aplicar situaciones en diversos contextos de la química.

2. Objetivos

1. Identificar las diferentes bases de datos especializadas y los algoritmos de búsqueda que la integran para utilidad en diversas áreas de la química.
2. Aplicar herramientas de Excel para la solución de ecuaciones multivariadas, creación de métodos de validación con funciones condicionales y VBA para tratamiento de datos en diferentes campos de la química.
3. Realizar simulaciones moleculares por métodos químico-cuántico computacionales y quimioinformáticos para la interpretación de propiedades y fenómenos químicos en diversas áreas de la química.
4. Utilizar el lenguaje de programación Python con la herramienta Jupyter notebook para diseñar material o programas básicos de utilidad en diferentes campos de la química.

Correspondencia con los objetivos del programa:

Desarrollar habilidades en el Químico Industrial que le permitan realizar búsqueda y análisis de información y comunicarla de forma oral y escrita haciendo uso de las tecnologías de la información y la comunicación.

3. Resultados de aprendizaje

1. Distinguir las diferentes bases de datos, algoritmos de búsqueda, notaciones químicas y conceptos de quimioinformática, por medio de software especializado o herramientas web en trabajos de análisis de información de compuestos químicos con aplicación industrial o farmacéutica.
2. Desarrollar herramientas de Excel para soluciones de ecuaciones, análisis estadístico, interpretación gráfica y aplicaciones de VBA, mediante trabajos con funciones dinámicas que integren usos en investigación e industria química.
3. Simular por métodos de química cuántica computacional y quimioinformáticos propiedades de compuestos químicos, mediante software especializado que expliquen la aplicación industrial, investigativa o farmacéutica.
4. Desarrollar aplicaciones en química, por medio del lenguaje de programación Python con herramientas Jupyter Notebook que simula procesos de laboratorio.

2. Contenido

1. Conceptos generales (8 horas).
2. Bases de datos (12 horas).
3. Excel avanzado (12 horas).
4. Simulaciones con software especializado (20 horas).
5. Python y notebook (12 horas).

3. Requisitos

Asignaturas que deben ser aprobadas (prerrequisitos): Informática I y matemáticas III.

Saberes previos (presaberes): manejo de buscadores, ofimática, estructura molecular, y análisis químico básico.

4. Recursos

Lecturas obligatorias (libros).

1. Stanley, R., Crouch, F., James, Holler. Applications of Microsoft® Excel in Analytical Chemistry, 2 ed., USA, Brooks/Cole, Cengage Learning. 2014.
2. Johann, Gasteiger, Thomas, Engel, Chemoinformatics: A Textbook, 1ed, USA, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. 2003.
3. Warren J. HEHRE. A guide to molecular Mechanics and Quantum Chemical calculations. Wavefunction Inc., 2003.
4. The Python Tutorial. <https://docs.python.org/3/tutorial/>. Acceso en 07/06/2022.

Herramientas informáticas o software.
<https://openmolecules.org/datawarrrior/download.html>
<https://www.msg.chem.iastate.edu/games/download.html>
<https://sites.google.com/site/allouchear/Home/gabedit/download>
<https://vina.scripps.edu/>
<https://autodock.scripps.edu/>

Recursos de internet.
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
<http://www.chemspider.com/>
<http://biblioteca.utp.edu.co/recursos-electronicos/378/listado-general-de-bases-de-datos-2022>

5. Herramientas técnicas de soporte para la enseñanza

Clase magistral con herramientas TIC, material multimedia de presentaciones en clase, uso de plataformas de servicio web educativo, utilización de ordenadores en temas del curso, videotutorial de temas del curso y manejo de software o herramientas web, tutorías de manejo de herramientas web y software, guía paso a paso de manejo de herramientas web o software, trabajos grupales sobre herramientas web o simulación, realización y presentación de un proyecto final grupal en relación a los contenidos del curso, examen individual.

6. Trabajos en laboratorio y proyectos

Proyecto final: video de explicación de los trabajos realizados durante el curso con manejo de las herramientas web o software, interpretación de los resultados y conclusiones por medio aplicaciones de multimedia libre (8 h).

7. Métodos de aprendizaje

El método de enseñanza y aprendizaje del curso de informática II, se basa en el aprendizaje significativo y constructivista que tiene como principio en el alumno analizar, elaborar, y construir su conocimiento. Este método permite al estudiante mediante la solución de trabajos de análisis de información, funciones dinámicas, simulación con software especializado y desarrollo de aplicaciones afiance los conocimientos para que posteriormente plantee soluciones, relacione términos y proporcione respuestas a diferentes problemas asociados con los temas del curso en las diversas áreas de la química, y su utilización a nivel investigativo e industrial.

8. Métodos de evaluación

Se desarrollan 4 trabajos escritos que se relacionan con las 4 unidades del curso cada uno tiene equivalencia del 60%, un proyecto final que corresponde al 25 %, y una prueba escrita que corresponde al 15%. El momento de aplicación de los trabajos son actividades intermedias, el proyecto final y la prueba escrita en la actividad final.

El método de evaluación es coherente con la forma de verificar los resultados de aprendizaje porque en los trabajos, el proyecto y la prueba escrita se incluye el análisis de información, las funciones dinámicas, simulación con software especializado y desarrollo de aplicaciones que evidencian la forma de observar el progreso en el resultado de aprendizaje que se quiere enfocar.