



QI452: 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 I - 2026
Semestre y año en que se imparte	Semestre IV - Año 2
Tipo de asignatura	<input checked="" type="checkbox"/> Obligatoria <input type="checkbox"/> Electiva
Número de créditos ECTS	4
Director o contacto del programa	Hoover Albeiro Valencia Sánchez
Coordinador o contacto de la asignatura	Johny Roberto Rodríguez Pérez

Descripción y contenidos

1. Breve descripción

El curso de Informática II se basa en la búsqueda de información en bases de datos y el manejo de herramientas informáticas aplicadas a temas transversales de la química. Aborda el uso de funciones en hojas de cálculo para tareas estadísticas y resolución numérica de problemas químicos; también busca introducir al estudiante en la simulación molecular mediante software de química cuántica, quimioinformática y acoplamiento molecular para explicar propiedades de compuestos. También ofrece elementos de programación básica en Python para diseñar o aplicar herramientas orientadas al trabajo químico. Asimismo, este espacio académico fortalece el desarrollo científico, el razonamiento cuantitativo y la lectura crítica del estudiante, permitiéndole analizar, evaluar y aplicar conocimientos en diversos contextos de la química.

2. Objetivos

1. Identificar diferentes bases de datos especializadas y los algoritmos de búsqueda con el propósito de encontrar en estas datos e información química.
2. Aplicar herramientas de hojas de cálculo para la solución de ecuaciones multivariadas, diseño de métodos de validación con funciones condicionales y s 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 como Python 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 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, farmacéutica o alimentaria.
2. Desarrollar herramientas en hojas de cálculo para soluciones de ecuaciones, análisis estadístico, interpretación gráfica y aplicaciones, mediante trabajos con funciones dinámicas que integren usos en investigación e industria química.
3. Simular por métodos de química cuántica computacional y quimioinformática propiedades de compuestos químicos, mediante software especializado que expliquen la aplicación industrial, investigativa o farmacéutica.
4. Desarrollar aplicaciones en química, utilizando lenguajes de programación como Python.

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. Phyton y notebook (12 horas).

3. Requisitos

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

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/datawarrior/download.html>

<https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/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

IS133-Informática I

Las actividades del curso incluyen clases apoyadas en herramientas TIC, el uso de material multimedia y presentaciones en clase, así como la utilización de plataformas educativas web y ordenadores aplicados a los temas del curso. Se emplean también videotutoriales sobre los contenidos y sobre el manejo de software o herramientas web, complementados con tutorías y guías paso a paso para su uso. Además, se realizan trabajos grupales centrados en herramientas web o simulación, la elaboración y presentación de un proyecto final grupal relacionado con los contenidos del curso, y un 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 fundamenta en el aprendizaje significativo y el constructivismo, cuyos principios orientan al estudiante a analizar, elaborar y construir su propio conocimiento. Este enfoque permite que mediante la resolución de trabajos de análisis de información, funciones dinámicas, simulación con software especializado y desarrollo de aplicaciones, un estudiante afiance sus conocimientos. De esta manera, logra posteriormente plantear soluciones, relacionar términos y dar respuesta a distintos problemas asociados a los temas del curso en diversas áreas de la química, así como aplicar lo aprendido en contextos investigativos e industriales.

8. Métodos de evaluación

La evaluación del curso se compone de tres tipos de actividades. Los trabajos prácticos, en los que se aplican los contenidos vistos durante el curso, representan un 60% de la calificación total. El proyecto final aporta un 25%, y una prueba escrita corresponde al 15%. Los trabajos prácticos se desarrollan como actividades intermedias, mientras que el proyecto final y la prueba escrita se realizan en la actividad final del curso.

Este método de evaluación resulta coherente con la verificación de los resultados de aprendizaje, ya que tanto en los trabajos prácticos como en el proyecto final y la prueba escrita se integran elementos fundamentales del curso: análisis de información, funciones dinámicas, simulación con software especializado y desarrollo de aplicaciones. Dichos elementos permiten evidenciar el progreso del estudiante en relación con el resultado de aprendizaje que se pretende enfocar.