

Universidad 2024

TITULO: LOS PRINCIPALES NODOS INTEGRADORES DE LOS CONTENIDOS QUÍMICOS EN LA CARRERA DE INGENIERÍA EN BIOINFORMÁTICA

TITLE: THE MAIN INTEGRATING NODES OF CHEMICAL CONTENTS IN THE BIOINFORMATICS ENGINEERING CAREER

Autores:

Nilda Delgado Yanes, Dr.C.

Profesora Titular

Profesora principal de año académico

nildady@uci.cu

Universidad de las Ciencias Informáticas, Cuba

Cecilia de la Caridad González González

Estudiante de la carrera de Ingeniería en Bioinformática

ceciliadlcgg@estudiantes.uci.cu

Universidad de las Ciencias Informáticas, Cuba

Ayron Thomas Sánchez Tamayo

Ingeniero en Bioinformática

Recién graduado en adiestramiento

ayrontst@uci.cu

Universidad de las Ciencias Informáticas, Cuba

Resumen

La Bioinformática es una ciencia transdisciplinar, en la que confluyen la Informática, la Biología, la Química y la Física; que se enfoca en la investigación, desarrollo y/o aplicación de herramientas informáticas para la solución de problemas biológicos, médicos o biotecnológicos, donde el estudio de los contenidos relacionados con la química es especialmente útil pues facilita la comprensión de la complejidad de los organismos vivos. Luego de la caracterización de los procesos formativos que se sustentan en las Tecnologías de la Información y las Comunicaciones; en particular en la carrera Ingeniería en Bioinformática, como parte de los resultados del proyecto de investigación “Estrategia didáctica que potencie la utilización de los entornos virtuales de aprendizaje” en la carrera, se detectó inconsistencia en el uso del entorno virtual de aprendizaje, manifestada en la escasa preparación de docentes y en la carencia de la identificación de los nodos integradores que permiten darle un enfoque a la enseñanza de la química que sirvan de base a otras disciplinas de la carrera. El objetivo de este trabajo es identificar los principales nodos integradores que permitan la preparación de los profesores en los contenidos químicos, en función de los procesos formativos de la carrera de Ingeniería en Bioinformática. Los métodos utilizados fueron: el analítico sintético, el histórico lógico, el análisis documental, la observación y la entrevista, además, se utilizaron algunas herramientas informáticas. Los resultados alcanzados se concretan la identificación de nodos integradores de la carrera para la preparación de los profesores en los contenidos químicos.

Palabras claves: nodos, mecanismos, procesos, reacciones, integradores

Abstract

Bioinformatics is a transdisciplinary science, in which Computer Science, Biology, Chemistry and Physics converge; it focuses on the research, development and/application of computer tools for the solution of biological, medical or biotechnological problems, where the study of contents related to chemistry is especially useful because it facilitates the understanding of the complexity of living organisms. After the characterization of the formative processes that are supported by the Information and Communication Technologies; particularly in the Bioinformatics Engineering career, as part of the results of the research project "Didactic strategy that enhances the use of virtual learning environments" in the career, inconsistency was detected in the use of the virtual learning environment, manifested in the poor preparation of teachers and in the lack of identification of the integrating nodes that allow giving an approach to the teaching of chemistry that serve as a basis for other disciplines of the career. The objective of this work is to identify the main integrating nodes that allow the preparation of teachers in chemical contents, according to the formative processes of the Bioinformatics Engineering career. The methods used were: synthetic analytical, historical-logical, documentary analysis, observation and interview, and some computer tools were also used. The results achieved are the identification of integrating nodes of the career for the preparation of teachers in chemical contents.

Key words: nodes, mechanisms, processes, reactions, integrators

Introducción

En la Universidad de las Ciencias Informáticas, la utilización de los entornos virtuales de aprendizaje en el proceso docente de la carrera Ingeniería en Bioinformática es una de las prioridades en la actualidad.

La Bioinformática es una ciencia transdisciplinar, en la que confluyen la Informática y las Ciencias de la Vida como la Biología, la Química y la Física, entre otras; que se enfoca en la investigación, desarrollo y/o aplicación de herramientas informáticas para la solución de problemas biológicos, médicos o biotecnológicos, donde el estudio de los contenidos relacionados con la química es especialmente útil pues facilita la comprensión de la complejidad de los organismos vivos.

La disciplina Química en esta carrera, la integran las asignaturas "Química General y Orgánica" y "Macromoléculas" como parte del currículo propio y "Mecanismos de reacciones orgánicas" en el currículo optativo. Su colectivo de profesores ha realizado un estudio de los principales contenidos que deben conocer los estudiantes para facilitar la adquisición de conocimientos y el desarrollo de habilidades de los temas de las demás asignaturas y en el contexto del proyecto de investigación "Estrategia didáctica de innovación que potencie la utilización de los entornos virtuales de aprendizaje en el montaje de las asignaturas en la carrera de Ingeniería en Bioinformática de la Universidad de las Ciencias Informáticas".

El proyecto presentó como uno de los resultados: la caracterización de los procesos formativos que se sustentan en las Tecnologías de la Información y las Comunicaciones; en particular en la carrera, a partir de la mediación pedagógica, tecnológica y comunicacional, que evidenció inconsistencia en el uso del entorno virtual de aprendizaje, manifestada en la escasa preparación de docentes y en la carencia de la identificación de los nodos integradores que permiten darle un

enfoque a la enseñanza de la Química que sirvan de base a otras disciplinas de la carrera como la Biología y la Bioinformática.

El objetivo de este trabajo es identificar los principales nodos integradores que permitan la preparación de los profesores en los contenidos químicos, en función de los procesos formativos de la carrera de Ingeniería en Bioinformática. Para ello, los autores realizaron un análisis exhaustivo de los programas de varias disciplinas en la búsqueda de los contenidos que pudieran ser posibles nodos integradores y profundizaron en el estudio de procesos biológicos, temas que sirvieron de base en la elaboración de las acciones de preparación de los profesores en contenidos químicos-biológicos que se presentaron como parte de la estrategia didáctica del departamento docente en un estudio posterior.

Desarrollo

En este trabajo se consideran los nodos como un elemento integrador que propicia las relaciones interdisciplinarias en una disciplina, los cuales garantizan la integración entre todas las disciplinas y que facilita la formación integral del futuro profesional. (Fernández, 2015)

En el proceso de interacción entre las disciplinas, como aspecto importante se debe tener en cuenta, la determinación de los nodos evaluativos integradores que comprenden, tanto conceptos, como leyes, teorías, habilidades y valores de las disciplinas que pueden ser fundamentados en el proceso de enseñanza a partir de un enfoque integrador. Es por eso que se abordará a continuación algunos aspectos relacionados con los nodos en la enseñanza.

Nodos en la enseñanza

Según el diccionario de la Real Academia de la Lengua Española (1990), nexo significa "vínculo, enlace, unión, relación, ligadura, atadura, afinidad, familiaridad".

En (Baglan & Portuondo, 2016) los autores expresan que:

"todas las acciones a desarrollar en el componente académico y laboral facilitan la sistematización e integración de las asignaturas y deben determinarse los nodos de articulación intra e interdisciplinarios y sus relaciones, o sea las relaciones de precedencia, sincronía y consecutiva de los contenidos, en primer lugar, de la propia disciplina y luego con el resto de las disciplinas en especial con la didáctica particular".

Por otra parte Sagó (2018) define los nexos comunes "como invariantes de la carrera para determinar las líneas directrices y los nodos formativos en función del modelo del profesional" (p.119). La autora considera que "los nexos comunes constituyen un momento previo a la determinación de los nodos y, por tanto, no concibe que los nexos y los nodos signifiquen lo mismo, o sea, la determinación de los nexos entre las disciplinas permite el desarrollo de los nodos de integración" y agrega que en Cuba, "los nodos en la enseñanza constituyen un camino, una guía para lograr la interdisciplinariedad". (Sagó, 2018, p.119)

Según Fernández (2015) "los nodos son considerados aquellos contenidos de un tema de una disciplina o asignatura, que incluye conocimientos, habilidades y los valores asociados a él y que sirven de base en una carrera universitaria dada para lograr la formación más completa del egresado". (p.25)

Teniendo en cuenta los aspectos teóricos anteriores se procedió a identificar los nodos integradores de las disciplinas Biología, Química y Bioinformática de la carrera Ingeniería en Bioinformática.

Luego del análisis de los programas analíticos de las disciplinas, se determinaron en una primera aproximación las invariantes del conocimiento que pudieran considerarse nodos integradores. Por ejemplo: estructura de las sustancias, interacciones moleculares, propiedades de las sustancias macromoleculares o sustancias de interés biológico, mecanismos de reacciones químicas, el análisis cinético y energético de las reacciones orgánicas, los procesos biológicos como los mecanismos de acción enzimáticas y las bases de datos biológicas.

En la búsqueda de los contenidos sobre los principales nodos integradores se identificó como definición de estructura química de una sustancia, como: la composición, el orden de enlace de los átomos en las moléculas y su disposición espacial.

En el estudio de las sustancias orgánicas e inorgánicas luego de analizar su estructura por los aspectos que se mencionan en el párrafo anterior, se debe observar la forma geométrica que adopta finalmente la molécula, por ejemplo:

Ejemplo 1: la molécula metano:

Composición: un átomo de carbono y cuatro átomos de hidrógeno

Orden de enlace: los cuatro átomos de hidrógeno se unen por enlace covalente polar al átomo central que es el carbono.

Disposición espacial: forma un tetraedro regular

Análisis de su estructura: la forma que adopta la molécula de metano es también tetraédrica, ya que los cuatro enlaces carbono-hidrógeno ejercen un efecto simétrico cuya resultante del momento dipolo es nulo como puede apreciarse en la figura 1 del anexo 1.

Ejemplo 2: la molécula de amoníaco

Composición: un átomo de nitrógeno y tres átomos de hidrógeno

Orden de enlace: los tres átomos de hidrógeno se unen por enlace covalente polar al átomo central que es el nitrógeno.

Disposición espacial: forma una pirámide

Análisis de su estructura: la forma que adopta la molécula de amoníaco es también tetraédrica, pero deformada, por eso se dice que es piramidal, ya que los tres enlaces nitrógeno-hidrógeno ejercen un efecto cuya resultante del momento dipolo es igual a 1,63 D (Debyes) como se observa en la figura 2 del anexo 1.

De forma similar se realiza el análisis de la molécula de agua.

Ejemplo 3: molécula de agua

Composición: un átomo de oxígeno y dos átomos de hidrógeno

Orden de enlace: los dos átomos de hidrógeno se unen por enlace covalente polar al átomo central que es el oxígeno.

Disposición espacial: forma una pirámide

Análisis de su estructura: la forma que adopta la molécula de agua es también tetraédrica, pero deformada, por eso se dice que es angular, ya que los dos enlaces oxígeno-hidrógeno ejercen un efecto cuya resultante del momento dipolo es igual a 1,9 D (Debyes) como se observa en la figura 3 del anexo 1.

En el estudio de las interacciones moleculares se identificaron como contenidos a tener en cuenta: las interacciones moleculares por puente de hidrógeno y las fuerzas de Van der Waals.

En el caso de las propiedades de las macromoléculas se determinó que hacer énfasis en las propiedades físicas como la temperatura de fusión y de ebullición, la densidad y la solubilidad.

El mecanismo por el cual transcurre una reacción química se define como: “secuencia de pasos elementales mediante los que se produce una reacción química, entendido como paso elemental la reacción que ocurre en un solo paso” (Wade, 2004, p.126)

El análisis cinético y energético de las reacciones químicas contempla los conceptos: reacciones endotérmicas, reacciones exotérmicas, variación de entalpía de una reacción química, energía de activación, complejo activado, velocidad de la reacción química, así como, la expresión cinética de la velocidad de la reacción y los gráficos de energía cinética contra avance de la reacción.

Una vez determinado los nodos integradores principales en el estudio de contenidos químicos, se procedió a realizar un estudio de los principales mecanismos de reacciones orgánicas en macromoléculas, como por ejemplo, el mecanismo de acción catalítica de la quimotripsina, el cual consta de los pasos siguientes:

1. La histidina cede un protón al aspartato y lo recupera de la serina. Visto de otro modo: el aspartato capta un protón de la serina a través de la histidina.
2. a) La serina (desprotonada) es así capaz de atacar al enlace peptídico (ataque nucleófilo al carbonilo) y forma un intermediario tetraédrico; el sustrato queda así unido a la enzima de modo covalente (ahora es un estado de transición).
b) Se rompe el enlace peptídico y el extremo amino liberado (R) recupera un protón de la histidina.
c) La histidina, a su vez, lo recupera del aspártico.
3. a) El aspartato capta de nuevo un protón de la histidina, con lo que ésta puede captarlo a su vez del agua.
b) Se genera así un anión hidróxido que ataca al intermediario éster entre la serina y la parte carboxilo (R') del péptido sustrato.
c) Se forma un nuevo intermediario tetraédrico unido a la enzima (vía residuo de serina).
4. a) Se regenera el grupo carboxilo del péptido, separándose la serina y quedando así libre el otro fragmento peptídico (la parte R' con extremo carboxilo libre)
b) La serina recupera el protón a costa de la histidina, que a su vez lo capta del aspártico.
c) Se ha regenerado la tríada catalítica (Asp, His, Ser) en su estado original.

La figura 4 del anexo 2 muestra el estudio QM/MM del mecanismo y cinética de las reacciones de la proteasa NS3 del virus de la hepatitis C con sus sustratos principales.

Luego del análisis de los posibles nodos integradores se identificó como el eje principal integrador la estructura de las sustancias en las asignaturas de “Química General y Orgánica” y “Macromoléculas” donde los estudiantes deben reconocer, identificar y modelar las sustancias de interés biológico y en la asignatura

“Mecanismos de reacciones orgánicas” es donde deben concretar el nexo con los contenidos bioquímicos.

Otro de los nodos integradores lo constituye el análisis cinético y energético que se trata en la asignatura “Química General y Orgánica” con un tratamiento termoquímico y cinético de las sustancias y se aplica en la asignatura Mecanismos de reacciones orgánicas.

Una vez identificados los principales nodos integradores en los contenidos químicos, se procedió a realizar una entrevista grupal a los estudiantes que cursaron la asignatura optativa “Mecanismos de reacciones orgánicas”. Al respecto los estudiantes opinaron que los temas se centraron en el análisis de los mecanismos desde un punto de vista químico con un análisis termodinámico y cinético adecuado y que tenía relación con lo abordado en las asignaturas “Química General y Orgánica” y “macromoléculas, pero que la relación con los procesos biológicos se trató con poca profundidad.

Al respecto, los autores de este trabajo se dieron a la tarea de profundizar en el estudio de procesos biológicos y para ello se analizaron los informes de tesis de trabajos de diplomas de algunos de los estudiantes que realizaron sus investigaciones en centros cuyos proyectos estaban relacionados con la elaboración de vacunas y el estudio de algunas enfermedades de incidencia en la población cubana. Además, la aplicación del examen de premio de la asignatura optativa también se tomó como referencia para realizar la selección de las bases de datos biológicas a utilizar.

La principal base biológica a utilizar en el estudio de los mecanismos de reacción de procesos biológicos es la base de datos de mecanismos de catálisis enzimática del Instituto Europeo de Bioinformática (EBI) la cual se puede utilizar en las asignaturas relacionadas con la especialidad y con las disciplinas de Química y Biología, ya que, proporciona anotaciones sobre la proteína, los residuos catalíticos, los cofactores y los mecanismos de reacción de cientos de enzimas. Existen dos tipos de entradas en esa base de datos con notación M-CSA: las entradas de "mecanismo detallado" son más completas y muestran los pasos químicos individuales del mecanismo como esquemas con flechas de flujo de electrones y las entradas de 'Sitio Catalítico' anotan los residuos catalíticos necesarios para la reacción, pero no muestran el mecanismo (Anexo 3). De ahí, que pueden realizarse búsquedas de información sobre los mecanismos de reacciones y ser utilizados en las disciplinas en la carrera de Ingeniería en Bioinformática.

Conclusiones

Los principales nodos integradores de contenidos químicos que pueden ser utilizados en la preparación de los profesores del departamento de Bioinformática como parte del proceso formativo son: estructura de las sustancias, interacciones moleculares, propiedades de las sustancias macromoleculares o sustancias de interés biológico, mecanismos de reacciones químicas, el análisis cinético y energético de las reacciones orgánicas, los procesos biológicos como los mecanismos de acción enzimáticas y las bases de datos biológicas; aspectos que pueden integrarse en el estudio de los mecanismos de reacciones orgánicas y que pueden formar parte del sistema de contenidos de un curso de postgrado.

La base de datos de mecanismos de catálisis enzimática del Instituto Europeo de Bioinformática puede ser utilizada en las asignaturas de la disciplina Química, Biología y Bioinformática en la búsqueda de los mecanismos de reacciones orgánicas.

Referencias bibliográficas

- Baglan Favier, S. M., & Portuondo, L. M. (2016). *Programa de la disciplina Didáctica de la Química. Carrera Licenciatura Educación Química. Guantánamo.*
- Fernández Vivet, M. (2015). *Las relaciones interdisciplinarias desde la disciplina principal integradora Formación Laboral Investigativa.* [tesis]. Instituto Central de Ciencias Pedagógicas. Universidad de Guantánamo.
- Real Academia Española. (1990). En Diccionario de la lengua española. Océano Grupo Editorial, *España*, 150
- Wade, L.G. (2004). *Química Orgánica. Quinta Edición.* Pearson Educación. Madrid. p.547
- Sagó Massó D. (2018). *Una metodología para la evaluación del aprendizaje con enfoque integrador en la disciplina química general en la formación de profesores licenciados en Educación Química.* Recuperado de Tesis de Doctorado.

Anexos

Anexo 1. Estructura de diferentes sustancias

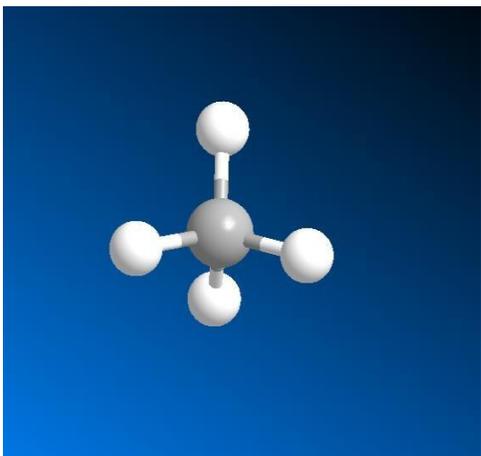


Figura 1. Estructura del metano

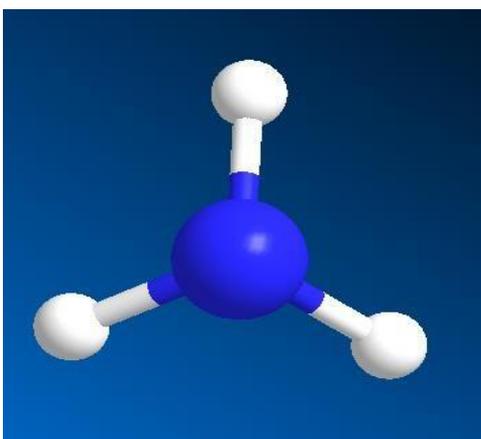


Figura 2. Estructura del amoníaco

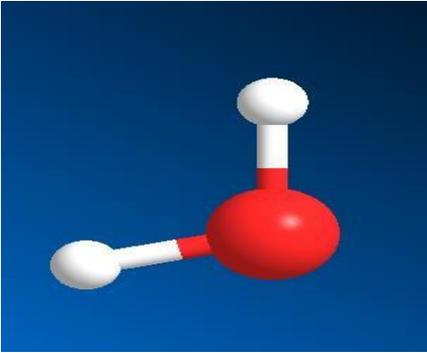
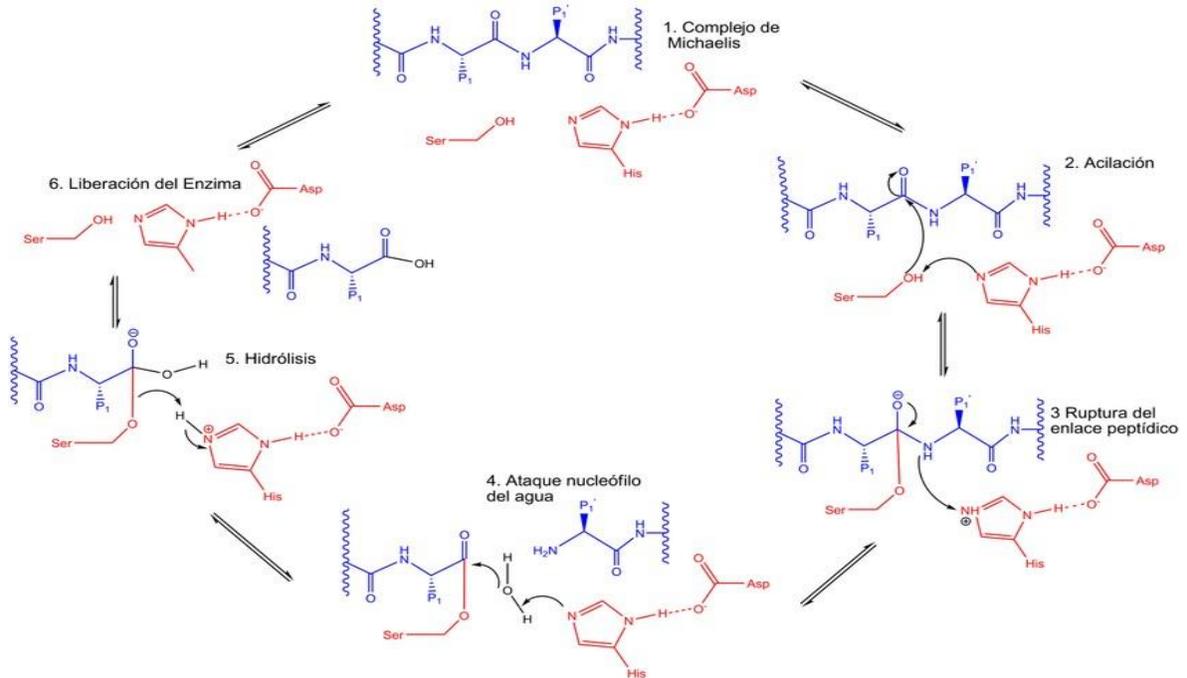


Figura 3. Estructura del agua

Anexo 2. Estudio QM/MM del mecanismo y cinética de las reacciones de la proteasa NS3 del virus de la hepatitis C con sus sustratos principales



Anexo 3. Base de datos de mecanismos de catálisis enzimática del Instituto Europeo de Bioinformática

The screenshot displays the M-CSA website interface. At the top, there is a navigation bar with 'EMBL-EBI' and links for 'Services', 'Research', 'Training', 'About us', and 'Log in'. The main header reads 'Mechanism and Catalytic Site Atlas' with a search bar containing 'racemase, 5.1.1.3, P56868' and an 'advanced' search option. Below the header is a navigation menu with 'Home', 'Browse', 'Search', 'Statistics', 'Download / API', 'Documentation', 'About', and 'Contact Us'. The main content area features a descriptive paragraph about M-CSA, followed by a detailed entry for 'Glutamate racemase'. This entry includes the biological species (*Aquifex pyrophilus*), UniProt and PDB links, and an 'example mechanism' diagram showing the reaction of glutamate to D-glutamate. To the right, a 'Features' sidebar offers buttons for 'All Entries', 'Search', 'Documentation', and 'About'. Below this is a 'Latest Statistics' section stating that as of 5th April 2023, the database contains 1003 hand-curated entries, 734 of which have detailed mechanistic descriptions, representing 895 EC numbers and 73211 residues. The Windows taskbar at the bottom shows the system time as 09:23 on 5/4/2023.

EMBL-EBI Services Research Training About us Log in

Mechanism and Catalytic Site Atlas

Search M-CSA
racemase, 5.1.1.3, P56868 advanced

Home Browse Search Statistics Download / API Documentation About Contact Us Log in

M-CSA is a database of enzyme reaction mechanisms. It provides annotation on the protein, catalytic residues, cofactors, and the reaction mechanisms of hundreds of enzymes. There are two kinds of entries in M-CSA. 'Detailed mechanism' entries are more complete and show the individual chemical steps of the mechanism as schemes with electron flow arrows. 'Catalytic Site' entries annotate the catalytic residues necessary for the reaction, but do not show the mechanism.

Glutamate racemase

example mechanism

Biological species: *Aquifex pyrophilus* (Bacteria)

Sequence: P56868 UniProt

PDB: 1b73 PDB

Catalytic CATH domains: 3.40.50.1860 PDB

Glutamate racemase is responsible for the synthesis of D-glutamate, an essential building block of peptidoglycan, found in bacterial cell walls where it provides structural integrity. Due to its uniqueness to bacteria, peptidoglycan, and enzymes involved in its biosynthesis, are targets for designing new antibacterial drugs. Peptidoglycan is formed from a repeating unit of a disaccharide, N-

All Entries
Search
Documentation
About

Latest Statistics

As of 5th April 2023, M-CSA contains 1003 hand-curated entries, 734 of them with detailed mechanistic description. The entries in M-CSA represent 895 EC numbers, 73211

09:23
5/4/2023

Nota: Foto tomada del sitio: <https://www.ebi.ac.uk/thornton-srv/m-csa/>