

POTENCIALIDADES DIDÁCTICAS DEL USO DE HERRAMIENTAS BIOINFORMÁTICAS  
EN EL FORTALECIMIENTO DE COMPETENCIAS TECNOLÓGICAS CON ENFOQUE  
INVESTIGATIVO

LAURA SOFÍA CAICEDO LEÓN

UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL  
FACULTAD DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA  
BOGOTÁ D.C.

2023

POTENCIALIDADES DIDÁCTICAS DEL USO DE HERRAMIENTAS BIOINFORMÁTICAS  
EN EL FORTALECIMIENTO DE COMPETENCIAS TECNOLÓGICAS CON ENFOQUE  
INVESTIGATIVO

LAURA SOFÍA CAICEDO LEÓN  
CÓD:2016215016

Trabajo de grado para optar por el título de  
LICENCIADA EN QUÍMICA

DIRECTOR  
RODRIGO RODRIGUEZ CEPEDA  
Químico, M. Sc y PhD en Educación

UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA  
PROYECTO DE INVESTIGACIÓN  
BOGOTÁ  
2023

Nota de aceptación

---

---

---

---

---

---

---

RODRIGO RODRÍGUEZ CEPEDA

Director

---

LINA MIREYA BELTRAN DALEMAN

Evaluadora

---

MARTHA JANNETH SAAVEDRA ALEMAN

Evaluadora

## Tabla de contenido

Introducción .....	8
Planteamiento del problema .....	10
Objetivos .....	13
Objetivos específicos: .....	13
Justificación.....	14
Antecedentes .....	16
Competencias investigativas .....	16
Bioinformática .....	17
Aprendizaje Basado en Investigación (ABI).....	19
Referentes conceptuales .....	21
Competencias investigativas .....	21
Bioinformática .....	25
<i>Docking</i> .....	27
<i>Contexto en que será usado el docking o acoplamiento molecular</i> .....	28
Aprendizaje Basado en investigación (ABI).....	31
Metodología .....	33
Tipo de investigación.....	33
Población.....	33
Fases de la investigación.....	34
<i>Fase de planeación</i> .....	34
<i>Fase de diseño</i> .....	34
<i>Fase de implementación</i> .....	34
Fase de análisis y evaluación de la implementación .....	39
Resultados y Análisis .....	39
De la prueba de entrada.....	40
De la infografía .....	46
Del Reto 1 .....	51
Del Reto 2 .....	57
Del Reto 3 .....	59
Del Reto 4 .....	63
De la prueba de salida .....	68
Conclusiones .....	81
Referencias .....	81
Anexos.....	<b>Erreur ! Signet non défini.</b>

## **Lista de tablas**

### **Tabla 1**

Estructura del programa de licenciatura en química con relación a la formación de competencias, por semestre, ciclos y componentes de formación.

### **Tabla 2**

Links para recursos virtuales y bases de datos de utilidad para la enseñanza de bioquímica.

### **Tabla 3**

Contenido de tocoferoles (mg/kg) en aceite de semillas de mora extraídos con co2 supercrítico

### **Tabla 4**

Actividades previstas para la primera sesión según el programa guía de actividades diseñado

### **Tabla 5**

Actividades asincrónicas desarrolladas posterior a la primera sesión

### **Tabla 6**

Actividades previstas para la segunda sesión según el programa guía de actividades diseñado

### **Tabla 7**

Actividades asincrónicas desarrolladas posterior a la segunda sesión

### **Tabla 8**

Actividades previstas para la tercera sesión según el programa guía de actividades diseñado

### **Tabla 9**

Actividades previstas para la cuarta sesión según el programa guía de actividades diseñado

### **Tabla 10**

Rúbrica de evaluación de infografía

### **Tabla 11**

Resultados arrojados por spss para el análisis de los resultados arrojados

### **Tabla 12**

Rúbrica de evaluación de calidad de proteína

### **Tabla 13**

Estadísticas de fiabilidad de la rúbrica de evaluación de calidad de proteína

### **Tabla 14**

Resultados de rúbrica de evaluación calidad de proteína

### **Tabla 15**

Formato para la propuesta de actividades mediadas por herramientas bioinformáticas

## Tabla 16

Rúbrica de evaluación del reto 4

## Tabla 17

Compendio de resultados obtenidos en spss statistics para la rúbrica de evaluación de calidad del reto 4

### Lista de figuras

Figura1	
Estructura Del Programa De Licenciatura En Química Con Relación A La Formación De Competencias, Por Semestre, Ciclos Y Componentes De Formación.....	22
Figura 2	
<i>Competencias Asociadas A Los Formadores En Ambientes De E-Learning.....</i>	24
Figura 3 .....	28
<i>Posibles Posiciones Y Conformaciones De Un Ligando Al Interactuar Con Un Blanco Proteico .....</i>	28
Figura 4 .....	30
<i>Proceso de Mutación de los Cromosomas 9 y 22 que genera el cromosoma Filadelfia .....</i>	32
Figura 5 .....	40
<i>Tipos</i>	
Figura 6 .....	41
<i>Red Estructural Construida Entorno Al Concepto De Bioinformática Propuesto Por La National Human Genome Research Institute (2022).....</i>	41
Figura 7 .....	42
<i>Red Estructural Construida A Partir De Los Conceptos Encontrados En La Respuesta Del E7 .....</i>	42
Figura 8 .....	
<i>Red Estructural Construida A Partir De Los Conceptos Encontrados En La Respuesta Del E22 .....</i>	
Figura1 .....	
Figura 9 .....	43
<i>Red Estructural Construida A Partir De Los Conceptos Encontrados En La Respuesta Del E8 .....</i>	43
Figura 10 .....	43
<i>Red Estructural Construida A Partir De Los Conceptos Encontrados En La Respuesta Del E10 .....</i>	43
Figura 11 .....	44
<i>Diagrama De Pareto Realizado A Partir De Los Programas Utilizados A Lo Largo De La Carrera Por Los Docentes En Formación .</i>	44
Figura 12 .....	45
<i>Resultados De La Pregunta De Si Utilizaron Los Programas Para El Desarrollo De Tópicos Relacionados Con Genética, Fármacos O Enfermedades .....</i>	45
Figura 13.....	46
<i>Resultados De La Pregunta De Si Tienen Conocimientos Acerca Del Docking Molecular .....</i>	46
Figura 14 .....	48
<i>Resultados De La Calidad De Las Infografías Presentadas Por Los Grupos .....</i>	48
Figura 15 .....	49
<i>Infografía Presentada Por El G5 Evaluada Como De Excelente Calidad Según La Evaluación.....</i>	49
Figura 16 .....	50
<i>Infografía Presentada Por El G7 Evaluada Como De Calidad Media Según La Evaluación.....</i>	50
Figura 17 .....	54
<i>Cuadro Explicativo De La Selección De Proteína Del G5 .....</i>	54
Figura 18 .....	55
<i>Cuadro Explicativo De La Selección De Proteína Del G4 .....</i>	55
Figura 19 .....	55
<i>Justificación Del G1 Para La Selección De Proteína .....</i>	55

Figura 20 .....	56
<i>Justificación Del G3 Para La Selección De Proteína .....</i>	<i>56</i>
Figura 21 .....	58
<i>Resultados De Docking Molecular De La Autora Para Realizar Comparaciones Del Posible Rendimiento De Los Ligandos .....</i>	<i>58</i>
Figura 22 .....	58
<i>Ligando Más Postulado Por Los Grupos Como El Más Eficaz Por El Tratamiento De La Lmc .....</i>	<i>58</i>
Figura 23 .....	60
<i>Grupos Que Seleccionaron La Cadena Apropiaada Para Realizar El Docking .....</i>	<i>60</i>
Figura 24 .....	60
<i>Evidencia Del Reto 3 Realizada Por El G4 .....</i>	<i>60</i>
Figura 25 .....	61
<i>Resultados Del Docking Molecular De Los 7 Grupos .....</i>	<i>61</i>
Figura 26 .....	62
<i>Resultado De Docking Molecular Del G4 .....</i>	<i>62</i>
Figura 27 .....	65
<i>Resultados De La Rúbrica Aplicada Al Reto 4 .....</i>	<i>65</i>
Figura 28 .....	66
<i>Primera Parte De La Actividad Presentada Por El G1 Para El Reto 4 .....</i>	<i>66</i>
Figura 29 .....	67
<i>Segunda Parte De La Actividad Presentada Por El G1 Para El Reto 4 .....</i>	<i>67</i>
Figura 30 .....	69
<i>Red Estructural Construida Entorno Al Concepto De Bioinformática Contemplando El Contexto De La Aplicación Del Taller .....</i>	<i>69</i>
Figura31 .....	70
Tabla De Frecuencias De Códigos Más Mencionados En Las Respuestas Abiertas Según Atlas.....	70
Ti 70	
Figura 32 .....	71
<i>Diagrama De Sankey Construido A Partir De La Frecuencia De Códigos Encontrado En Las Definiciones De Los Docentes En Formación .....</i>	<i>71</i>
Figura 33 .....	72
<i>Red Estructural Construida A Partir De Los Conceptos Encontrados En La Respuesta Del E7 Después De La Aplicación Del Taller .72</i>	<i>72</i>
Figura 34 .....	72
<i>Red Estructural Construida A Partir De Los Conceptos Encontrados En La Respuesta Del E7 Después De La Aplicación Del Taller .72</i>	<i>72</i>
Figura 35 .....	73
<i>Red Estructural Construida Entorno Al Concepto De Docking Según La Definición Postulada Por Ballon Paucara Y Grados Torrez (2019).....</i>	<i>73</i>
Figura 36 .....	74
<i>Cuadro De Frecuencias Y Diagrama De Sankey.....</i>	<i>74</i>
Figura 37 .....	75
<i>Red Estructural Construida Entorno Al Concepto De Docking Por El E19 Posterior A La Aplicación Del Taller .....</i>	<i>75</i>
Figura 38 .....	76
<i>Red Estructural Construida Entorno Al Concepto De Docking Por El E22 Posterior A La Aplicación Del Taller .....</i>	<i>76</i>
Figura 39 .....	76
<i>Programas Más Utilizados Por Los Docentes En Formación Después De La Aplicación Del Taller .....</i>	<i>76</i>
Figura 40 .....	77
<i>Resultados De Perspectiva De Usos De Las Herramientas Bioinformáticas En Los Colegios .....</i>	<i>77</i>
Figura 41.....	83
<b>Resultados de la prueba Likert para determinar el nivel de logro de cada uno de los criterios que componían a la competencia seleccionada</b>	

## **Lista de anexos**

Anexo 1. Preguntas de la prueba de entrada.

Anexo 2: Guía Leucemia Mieloide Crónica: Origen genético de la enfermedad.

Anexo 3: Infografía sobre la LMC y su relación con la extracción de alfa tocoferol para su posible tratamiento.

Anexo 4: Link para acceder al video "Introducción a la bioinformática"

Anexo 5: Link para acceder al video "¿Cómo seleccionar proteínas en el PDB?"

Anexo 6. Diapositivas bioinformáticas.

Anexo 7. Criterios de selección de proteínas.

Anexo 8. Guía de ayuda para la selección de proteínas en PDB

Anexo 9. Guía para el Reto 1.

Anexo 10. Guía de corrección del reto 1.

Anexo 11: Guía de refinamiento de ligandos y proteínas.

Anexo 12: Guía del reto 2.

Anexo 13: Link para acceder al video "¿Cómo limpiar una proteína en UCFS Chimera para realizar docking molecular?"

Anexo 14: Guía de docking molecular.

Anexo 15: Guía de reto 3.

Anexo 16. Preguntas de la prueba de salida.

Anexo 17. Guía del reto 4



## Introducción

El presente trabajo de investigación hace parte de los requisitos para poder optar por el título de licenciada en Química de la Universidad Pedagógica Nacional (UPN) y se realizó en el marco de los objetivos del semillero de investigación Chimeía, International student chapter ACS-UPN. El principal objetivo de este trabajo es evaluar cuáles implicaciones didácticas tiene la incorporación de herramientas bioinformáticas en el fortalecimiento de la competencia investigativa de carácter tecnológico: "Saber utilizar programas específicos de su disciplina," en una clase de bioquímica de la UPN. Por lo que se propone un programa guía de actividades con enfoque ABI (Aprendizaje Basado en Investigación) que dispone como contexto de investigación a una de las aplicaciones de la bioinformática: El docking molecular. Dado que, éste permite identificar posibles compuestos que se pueden utilizar en el tratamiento de enfermedades, en este caso se trabaja con la Leucemia Mieloide Crónica (LMC) como enfermedad y se propone un compuesto extraído del aceite de semilla de mora para su tratamiento: El alfa-tocoferol.

Teniendo en cuenta que la bioinformática ha ganado campo en el último siglo, no sólo en aplicaciones biotecnológicas empleadas, por ejemplo, en el tratamiento de la información del virus SARS-CoV-2 o en la investigación de compuestos para su posible utilización en la industria farmacéutica, sino también planteando nuevas posibilidades en los últimos años entorno a su aplicación en las aulas de bioquímica, planteando discusiones reflexivo-pedagógicas entre los docentes. El uso de herramientas bioinformáticas se presenta entonces como una oportunidad en el ámbito educativo para desarrollar conocimientos temáticos de bioquímica y, como un segundo efecto, generar espacios que favorezcan el fortalecimiento o desarrollo de competencias investigativas.

En consecuencia, este documento en primera instancia, postula la importancia de formar docentes que al ejercer su práctica sean docentes investigadores. Por lo que se presenta la relevancia de que las instituciones formadoras incorporen en sus planes curriculares los espacios de aprendizaje que favorezcan y consoliden competencias investigativas que cualifiquen a los docentes. Posteriormente, se presenta, la pertinencia, las implicaciones y los aportes que el trabajo pretende aportar. Seguido de esto, se realiza una presentación del estado de la investigación en este mismo campo y bajo la visión adoptada en este trabajo: competencias investigativas, bioinformática y aprendizaje por investigación. Consecuentemente, se presenta la metodología adoptada para la ejecución del proyecto. Finalmente, se presentan los resultados obtenidos en esta investigación, el análisis de estos y los referentes conceptuales que permitieron el desarrollo del documento.

## Planteamiento del problema

La educación dependiendo de los contextos en los que se encuentre inmersa se enfrenta a diferentes retos. En el caso de Colombia, el Ministerio de Educación Nacional (MEN), definió los 10 desafíos centrales que atraviesa la educación en el país y atendiendo a ellos construyó el Plan Nacional Decenal de Educación Nacional (PNDEN), cuya ejecución está prevista para el periodo 2016-2026. Este documento presenta un análisis de las principales problemáticas educativas del país (Acceso y cobertura, permanencia, calidad, pertinencia, y financiación) y plantea estrategias desde las políticas públicas para enfrentarlas (MEN, 2016).

La cualificación del docente y su nivel de formación se sitúan como determinantes positivos que favorecen la calidad de la educación. Por tanto, una de las estrategias planteadas por el PNDEN frente a la calidad educativa es: la construcción de una política pública enfocada en la formación de educadores (MEN, 2016). Lo que refleja una relación directa entre la calidad educativa recibida por el docente y su posterior desempeño profesional. En ese sentido, la calidad en los procesos de formación de los docentes se considera un punto determinante puesto que, según diversas investigaciones realizadas por Compartir (2014), a mayor nivel de formación, las estrategias planteadas para el aula favorecen en mayor medida los procesos de aprendizaje de los estudiantes (MEN, 2022).

Dentro de las estrategias específicas planteadas por el MEN (2017) en el PNDEN para cumplir este cuarto desafío se presentan, en primer lugar, la promoción de la formación investigativa en todas las licenciaturas ofertadas a nivel nacional, tanto en la parte pedagógica como en la disciplinaria, ya sea por medio de semilleros o grupos de investigación (p.47). Sin embargo, puede surgir la pregunta sobre ¿cuál es el aporte de un docente investigador? Ya que desde el MEN se plantea la necesidad de su promoción. Según Briñez (2015), la existencia de los docentes investigadores cobra relevancia porque el ejercicio de investigar responde a nuevas necesidades de los contextos educativos y, por tanto, ofrece soluciones que en ocasiones se pueden traducir en innovación educativa. Además, de infundir en los procesos educativos una visión crítica y reflexiva frente a sus propios procesos mejorando así la calidad del ejercicio en las aulas.

Desde la perspectiva de Saborío (2015), la necesidad de que los docentes investiguen radica en la misma naturaleza de la realidad educativa, puesto que es dinámica, viva y evolutiva. Un ejemplo del dinamismo al que se enfrentan las realidades educativas es presentado por Colman (2021), ya que, en la emergencia sanitaria ocasionada por el virus SARS-CoV-2 la población, que en su gran mayoría estaba concentrada en la educación presencial, tuvo que adaptar en pocos meses sus dinámicas a los ambientes de aprendizaje digital: *e-Learning*. La pandemia no sólo enfrentó a los ambientes educativos, sino que el ámbito farmacéutico afrontó un desafío de gran magnitud, puesto que requería de encontrar una vacuna a contra reloj. Así pues, la bioinformática cobró protagonismo, dado que permitió el análisis, interpretación y modelización de la información en torno al SARS-CoV-2 (ISCIII, 2020).

Este ejemplo permite dilucidar cómo el proceso de investigación responde no solo a realidades educativas, sino a problemáticas sociales, por lo tanto, el papel de los investigadores es vital para

dar respuesta a ellas. Saborío (2015) describe a los procesos investigativos como una herramienta que contribuye al desenvolvimiento de los profesionales, ya que, requieren de competencias del saber y del saber-hacer para generar soluciones adaptadas a los contextos. Frente a dichas competencias enunciadas, el PNDEN (2016) dispone como estrategia de diseño y definición, que las entidades dedicadas a la formación docente se dediquen al fortalecimiento de las competencias, capacidades y saberes que convierten al profesor en ese sujeto transformador de realidades educativas. Además, propone también que no sólo se usen las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC) para el desarrollo de las clases como una herramienta de gestión (proyección de imágenes, búsqueda de información y proyección de diapositivas), sino que sean explotadas como una potencial herramienta pedagógica (p.46).

En ese sentido, desde la Licenciatura en Química de la UPN se plantea a la investigación como la perspectiva para enfrentar los problemas de enseñanza-aprendizaje porque la investigación cualifica al docente. Dicha cualificación se da en dos vías principales: El contenido y la práctica. Frente al contenido, se pueden tomar dos miradas, la generación de conocimientos o estrategias de enseñanza, o la comprobación de aquellas que ya están establecidas con el objetivo de mejorarlas. En lo que respecta a la práctica, se plantea a la investigación como un recurso metodológico para el desarrollo del conocimiento en el aula (UPN & Licenciatura en Química, 2018). Por lo que resulta determinante que los docentes egresados sean investigadores de sus aulas y que su formación les provea herramientas para generar innovación en los métodos de enseñanza aprendizaje.

Por tanto, considerando la intrínseca relación entre la cualificación del docente con la calidad educativa, el fortalecimiento de las competencias investigativas en los procesos de formación profesional, sobre todo integrando a las TIC como herramienta pedagógica, se presenta como una oportunidad de innovación y de adaptación a la actual realidad educativa: la sociedad de los nativos digitales. Como consecuencia, los docentes de esta generación de profesores se van a enfrentar a poblaciones que se caracterizan por dominar con fluidez dispositivos e instrumentos digitales puesto que crecieron en entornos con acceso a la tecnología, e incluso actividades como informarse o entretenerse son mediadas por medio de herramientas digitales (García, 2021). Por consiguiente, la formación de los docentes debería propender porque ellos posean las capacidades para integrar a las TIC como una herramienta pedagógico-didáctica ya que las generaciones actuales demandan nuevas metodologías.

Por otra parte, considerando los cambios que deben afrontar los docentes para adaptar su modelo pedagógico-didáctico a los nuevos retos educativos mediados por las TIC y contemplando la transición gradual de diversos espacios académicos a modalidades híbridas (Actividades sincrónicas y asincrónicas) se hace necesario que los docentes egresados cuenten con las competencias básicas para desenvolverse asertivamente en ambientes virtuales.

Por lo que se considera la tesis doctoral realizada por Muñoz a profesores universitarios, quienes definieron las cuatro competencias más relevantes respecto al uso de las TIC en el aula:

“Saber utilizar el Internet para buscar información y recursos para la preparación de clases. Conocer sitios de Internet sobre su especialidad. Saber utilizar las principales herramientas de Internet para comunicarse (correo electrónico, chat, foros). Saber utilizar programas informáticos específicos de su campo profesional”. (Muñoz, 2008, como se citó en Mendoza, 2012, p.27).

En ese sentido, considerando la propuesta doctoral de Muñoz y la búsqueda del PNDEN de incorporar a las TIC como potenciales herramientas pedagógicas, se seleccionó la competencia: “Saber utilizar programas informáticos específicos de su campo profesional”. En vista que, esta competencia tiene una alta potencialidad didáctica, ya que el dominio de los softwares específicos podría favorecer las propuestas metodológicas en el aula y consecuentemente podría impactar el proceso de enseñanza-aprendizaje, lo que se traduciría en innovación educativa.

Como resultado, se pretende fortalecer dicha competencia frente a la utilización de programas específicos de su campo profesional, en un grupo de docentes en formación de la clase de bioquímica de la Licenciatura en Química de la UPN. Lo anterior, tomando como contexto la extracción de un compuesto derivado del aceite de mora (el alfa tocoferol) y proponiendo un posible uso farmacéutico en el tratamiento de la LMC, por medio del uso de herramientas bioinformáticas (PyRx, Chimera UCSF y Avogadro) y bases de datos de acceso libre (Protein Data Bank y Pubchem). Teniendo como guía para la construcción de actividades al Aprendizaje Basada en Investigación (ABI). Por lo que se define como pregunta de investigación:

¿Cuál es la influencia de la implementación de herramientas bioinformáticas, mediante un programa guía de actividades con enfoque ABI, en el fortalecimiento de la competencia “Saber utilizar programas informáticos específicos de su campo profesional” en una clase de bioquímica de la Licenciatura en química de la UPN?

## **Objetivos**

Evaluar la influencia de la implementación didáctica de herramientas bioinformáticas mediante un programa guía de actividades con enfoque ABI en el fortalecimiento de la competencia “Saber utilizar programas informáticos específicos de su campo profesional” en una clase de bioquímica con docentes en formación de la Licenciatura en química.

### **Objetivos específicos:**

1. Indagar por medio de un cuestionario de entrada los programas o herramientas informáticas que dominan los docentes en formación y sus conocimientos previos en cuanto a bioinformática y sus herramientas.
2. Diseñar un programa guía de actividades con enfoque ABI para la clase de bioquímica que propenda por el desarrollo de la competencia “Saber utilizar programas informáticos específicos de su campo profesional” enfocado en el uso de herramientas bioinformáticas y el aprovechamiento de compuestos bioactivos en el tratamiento de la LMC.
3. Determinar el impacto de la intervención didáctica en el fortalecimiento de la competencia “saber utilizar programas especializados de su campo profesional” mediante la evaluación formativa de las actividades aplicadas y un cuestionario de salida.

## Justificación

El presente trabajo investigativo pretende que un grupo de docentes en formación, pertenecientes al ciclo de profundización de la licenciatura en química, fortalezcan una competencia investigativa por medio de una intervención didáctica mediada por herramientas bioinformáticas. En este caso puntual, se trata de la competencia postulada por Mendoza (2012): “Saber utilizar programas informáticos específicos de su campo profesional” (p.27). Ya que, esta competencia en primera instancia se presenta únicamente como disciplinar o del *saber*, pero al integrarse a contextos específicos podría devenir en un potencial campo de exploración para las aplicaciones pedagógico-didácticas, como en el caso de este documento.

En ese sentido, la pertinencia de esta investigación es, en primera instancia, reconocer la importancia de fortalecer la competencia del saber utilizando programas especializados de su campo profesional con los estudiantes del ciclo de profundización del curso de bioquímica. Puesto que, por ejemplo, la incorporación de herramientas bioinformáticas bajo el contexto de enseñanza-aprendizaje de la bioquímica puede resultar una herramienta novedosa para las aulas, ya que aún no se ha alcanzado su máximo aprovechamiento pedagógico y didáctico. En segunda instancia, es pertinente porque permitirá que los docentes investigadores aporten de manera significativa a las realidades educativas a las que se aproximan con herramientas desarrolladas en la actualidad y propias del contexto de los nativos digitales. Además, el saber utilizar herramientas bioinformáticas apoya el desarrollo de procesos investigativos en torno a temáticas disciplinares y al planteamiento de actividades que incluyan su uso en el abordaje de problemáticas o contextos propuestos en ciencias.

Lo postulado anteriormente podría tener implicaciones en el ejercicio docente en dos niveles; A nivel de práctica, al incorporar didácticamente las herramientas bioinformáticas generando innovación en las estrategias de abordaje de temáticas en bioquímica; A nivel de contenido, al enfocarse en la enseñanza-aprendizaje de esta asignatura brindando una nueva perspectiva de aplicación de los conceptos, por ejemplo los posibles usos de compuestos bioactivos extraídos de aceites esenciales para el tratamiento de enfermedades, como es el caso de este documento. Lo anterior, se articula con la visión del departamento frente a la investigación y la cualificación que otorga al docente para enfrentar los problemas de enseñanza-aprendizaje.

Asimismo, gracias al abordaje de problemáticas a las que se les pueden brindar soluciones desde la bioinformática, se presentaría a la investigación en el aula como un proceso accesible, puesto que se requiere de un computador de gama media y lo que es primordial es la capacidad del estudiante para poder explotar al máximo las herramientas. Por ejemplo, en este documento, se plantea el tratamiento de desechos alimentarios como la problemática central, presentando como una alternativa de aprovechamiento la extracción de aceite esencial de semillas de mora. Con el objetivo de evaluar los principales componentes de éste y buscar por medio de las herramientas bioinformáticas sus posibles aplicaciones, para este ejercicio en el tratamiento de la Leucemia Mieloide Crónica. En ese sentido, el ejercicio de reflexión de la relación de los componentes

presentes en el aceite y el espectro de aplicaciones es donde las herramientas bioinformáticas cobran sentido como detonantes en el fortalecimiento de competencias investigativas.

Finalmente, los aportes teóricos se remitirán entonces a la exploración de las posibles aplicaciones didácticas de la utilización de herramientas bioinformáticas en la implementación de estrategias de enseñanza-aprendizaje para desarrollar o fortalecer, según el caso, la competencia: “Saber utilizar programas informáticos específicos de su campo profesional”. Sin embargo, su aplicación puede ser variada en el campo de la educación, lo que permitirá ampliar la perspectiva respecto a los softwares que se pueden usar en ambientes de aprendizaje presenciales o virtuales. Ya que, actualmente existe una alta demanda de incorporación en el aula de metodologías que contemplen el uso de herramientas tecnológicas. Además, de que podrán también realizar aportes de manera disciplinar puesto que la bioinformática es una herramienta emergente que posee un carácter altamente investigativo.

## **Antecedentes**

En el diario vivir de los docentes, ha existido una constante búsqueda por diversificar sus espacios de enseñanza-aprendizaje. Lo anterior ha sido posible, gracias a su visión, ya que les ha permitido transformar a la más mínima herramienta en una posible estrategia de enseñanza-aprendizaje. En el caso del presente trabajo, que busca evaluar la influencia de la implementación de herramientas bioinformáticas con el fin de fortalecer una competencia determinada como lo es “Saber utilizar programas específicos” por medio de actividades bajo el enfoque ABI, surge entonces la necesidad de ahondar en el estado actual de las temáticas para identificar posibles referentes teóricos y además poder dar cuenta del espacio que están teniendo las herramientas bioinformáticas como potencial herramienta didáctica en el campo específico de la enseñanza de la bioquímica. Por lo tanto, se realizó una búsqueda de material bibliográfico, mayoritariamente tesis y artículos, de los últimos diez años en los que se abordaban las siguientes temáticas: Competencias investigativas, bioinformática y aprendizaje basado en investigación (ABI).

### **Competencias investigativas**

Respecto a las competencias investigativas, se consultó dentro de los referentes nacionales, el trabajo propuesto por Angarita Sabogal, S., Berdugo Lombana, S. Y., & Moya Peralta, P. A. (2016) titulado: “Competencias investigativas en docentes en formación inicial a partir del estudio de las propiedades anticancerígenas del Agraz”. En este trabajo se toma la postura de fortalecimiento de competencias investigativas por medio del diseño e implementación de una secuencia didáctica. El contexto presentado es el cáncer y la posible influencia de los antioxidantes en su tratamiento. La perspectiva pedagógica por la que se inclinaron los autores es el aprendizaje por investigación y se aplicó a una población de 16 docentes en formación inicial que se encontraban cursando el espacio académico énfasis didáctico II centrado en la bioquímica. Con base en los resultados de este trabajo, se delimitó el presente trabajo al fortalecimiento de una única competencia, puesto que, el abordaje de múltiples competencias y su desarrollo fue una de las mayores dificultades del estudio desarrollado por estos autores. Además de reafirmar la selección del marco de aprendizaje por investigación como una buena elección.

En lo concerniente a referentes internacionales, se examina el trabajo de Hernández Navarro, M.I., Panunzio, A.P., Daher Nader, J., & Royero Moya, M. Ángel. (2019) titulado: “Las competencias investigativas en la Educación Superior”. En el que se plantean, por medio de una revisión bibliográfica en bases de datos especializadas, las concepciones actualizadas sobre los principales determinantes que se deben tener en cuenta a la hora de formar y desarrollar competencias investigativas en instituciones de educación superior. El aporte teórico fundamental de este documento es el planteamiento de la urgencia del desarrollo de competencias investigativas en la educación superior, puesto que repercute en la calidad de la educación de los egresados y en sus ejercicios como profesionales. Por lo que este trabajo, constituyó una base fundamental cuando se



evaluó la pertinencia de fortalecer las competencias investigativas en estudiantes de licenciatura en química y cómo éstas podrían impactar en su ejercicio docente.

En cuanto a la relación de las competencias investigativas del docente universitario, se utilizó una tesis de maestría desarrollada por Martínez, M., & Wilson, O. (2012), titulada: “Las competencias investigativas del docente universitario como fundamento de la función pedagógica del tutor en el modelo *E-Learning*”. Este trabajo es una investigación sobre el impacto de las competencias investigativas en el rol de los docentes como tutores *e-learning*. En ese sentido, se seleccionó como población a docentes y directores de investigación o currículo de 3 universidades de la ciudad de Bogotá (Escuela Colombiana de Carreras Industriales, la Fundación Universitaria del Área Andina y la Universidad Cooperativa de Colombia). Como conclusiones después de un estudio minucioso en cuanto al papel de la investigación en las Instituciones de Educación Superior (IES) se encuentra que estas universidades están considerando a los procesos de investigación únicamente como método de acreditación ante el MEN. Además, vincula la importancia de que los docentes desarrollen competencias para desenvolverse en ambientes que involucren al *e-learning*.

El anterior trabajo, consideró una base fundamental frente a la selección de la competencia investigativa a trabajar, puesto que permitió identificar la más acorde al presente trabajo de investigación frente a la implementación de la bioinformática en el desarrollo de las clases. Ya que, el autor realiza un amplio estudio de las diversas competencias investigativas que se pueden desarrollar en los docentes en formación. Anexo a esto, permite nuevamente evocar la necesidad de mejorar las competencias tecnológicas de los docentes en cuanto al manejo de las herramientas utilizadas en la virtualidad o en contextos informáticos, ya que esto beneficia su práctica docente. Finalmente, se plantea la necesidad de que los programas de formación de docentes planteen perfiles detallados frente a las competencias investigativas desarrolladas por sus egresados.

## **Bioinformática**

En cuanto a la bioinformática, como referente nacional se encuentra el trabajo postulado por la docente Gómez Daza, S. (2021), titulado: “Bioinformática como recurso educativo para enseñar variabilidad genética mediante la comparación de mapas de restricción”. En este trabajo se tomó a una población de 30 estudiantes de la asignatura “biología molecular” del período 2018-1 de la licenciatura en biología de la UPN, a los que se les aplicó una guía denominada: “Análisis de la variabilidad genética en especies de *Pseudomonas* mediante comparación de los mapas de restricción del gen *ptsN*”. Para la implementación de las actividades propuestas, se usaron dos herramientas bioinformáticas de acceso libre y disponibles en la web: Base de datos de nucleotide (NCBI) y NEBCutter2. Posterior a la evaluación, la docente menciona que se pudo evidenciar un progreso significativo en cuanto a procesos cognitivos, conceptuales y procedimentales en los estudiantes.

De este trabajo, se resalta su perspectiva de plantear a las herramientas bioinformáticas como recursos educativos, puesto que poseen un alto potencial que puede ser explotado en la enseñanza-aprendizaje de la bioquímica. Además del cómo sitúa a los estudiantes en un papel activo, dado que por medio de herramientas bioinformáticas a las que pueden acceder desde cualquier computador son ellos quienes se sumergen en procesos de características investigativas como el análisis, delimitación, interpretación, comprensión y síntesis de información. Adicionalmente, se plantea una de las ventajas de la incorporación de este tipo de herramientas en el aula que es la reducción de costos en prácticas de laboratorio que se suelen plantear en la enseñanza de la bioquímica. Finalmente, se plantean dichas herramientas bioinformáticas como un recurso educativo acertado en la enseñanza-aprendizaje de la bioquímica.

En lo que concierne al referente internacional, se seleccionó el artículo postulado por Martínez-Vaz, B. M., (2014) titulado: “Conceptos claves, laboratorios de investigación y bases de datos: estrategias para la enseñanza de Bioquímica en siglo XXI”. En el que el autor presenta una secuencia de aprendizaje basada en el aula invertida en la que se aprenden conceptos básicos de la bioquímica mediante la implementación de recursos bioinformáticos, sean bases de datos o herramientas, como: BLAST- Centro Nacional de Información en Biotecnología (NCBI), BLAST conserved domain database, CBLAST, Cn3D, BLASTX, TBLASTX, y TBLASTN. De este trabajo se resalta como conclusión la necesidad de plantear actividades investigativas en el aula mediadas por herramientas informáticas, en este caso, enfocadas en la bioinformática. También se recoge la postura de que la bioinformática se puede utilizar como un medio para actualizar los procesos de enseñanza de la bioquímica, adaptándola a un contexto en el que el uso de las tecnologías es una ventaja frente a los años anteriores.

Otro referente internacional, es el trabajo postulado por Olaya-abril, A. Y Cejas-Molina, M. (2018) titulado: “Bioinformática como recurso educativo: Proyecto de ingeniería genética”. El cual se aplicó en una población de docentes de secundaria y se utilizó una metodología de Aprendizaje Basado en Proyectos. El objetivo principal de este estudio fue desarrollar un proyecto en el contexto de la mutación del gen *NosZ* del organismo secuenciado *Paracoccus denitrificans*, estirpe PD1222, mediante una estrategia de mutación por doble recombinación. El proyecto se planteó con diferentes etapas, cada una de ellas, mediada por el uso de herramientas bioinformáticas y arrojó resultados satisfactorios. Entre estos, que la incorporación de la informática, tanto en niveles secundarios, como universitarios, convierten al estudiante en un sujeto activo de su proceso de aprendizaje.

Además, se encuentra un potencial como recurso educativo, puesto que las herramientas bioinformáticas son novedosas en las aulas de enseñanza de la bioquímica y resultan altamente atractivas gracias al aporte visual que dota a los conceptos de un soporte gráfico que puede posibilitar una mayor comprensión conceptual. Incluso, en este artículo se asevera que hay una garantía con respaldo teórico de que la implementación de estos recursos o herramientas en distintos contextos educativos genera aprendizajes significativos en los estudiantes, en contacto con las problemáticas establecidas para abordar la aplicación de los softwares bioinformáticos.

También desde el referente local y mucho más actualizado, se presenta el trabajo realizado por Duque Aranda, W. D. (2021), titulado: “Bioinformática: una herramienta didáctica para la enseñanza de la inhibición enzimática desde los estilos de aprendizaje”. En este caso, el objetivo principal fue la evaluación de la incorporación de herramientas bioinformáticas bajo el marco de los estilos de aprendizaje de Kolb y su posible influencia en la enseñanza-aprendizaje de la inhibición enzimática. Esta actividad fue planteada para un seminario titulado: “Taller de enzimas en la industria alimentaria”. El cual se desarrolló de manera remota con una población de 10 estudiantes de la licenciatura en química. En este caso particular, la autora sugiere que el uso de herramientas bioinformáticas favoreció la comprensión de la inhibición enzimática. Las herramientas que utilizó en su secuencia de actividades diseñadas para diferentes tipos de aprendizaje fueron: DruLiTo, Chimera USCF y AutodockTools; además de base de datos como Protein Data Bank y PubChem. El principal aporte de este trabajo es el de tener una base teórica positiva sobre el impacto de la inmersión de estas herramientas en espacios universitarios de enseñanza de la bioquímica.

Finalmente, el planteamiento de este trabajo desemboca en el docente como mediador entre estas herramientas y su visión para transformarlas en recursos didácticos. Ya que para dicha aplicación es imperante que el docente conjugue su saber disciplinar, su saber pedagógico-didáctico y su dominio de las herramientas para proponer los contextos en los que la bioinformática cobre sentido como un medio para la resolución de problemas de la vida real. Lo que es a su vez un reto reflexivo pedagógico como el que se pretende desarrollar en este trabajo.

### **Aprendizaje Basado en Investigación (ABI)**

En cuanto al Aprendizaje Basado en Investigación (ABI), se presenta la observación de que, en el mismo lapso de búsqueda, se encuentra un reducido volumen de artículos relacionados con la enseñanza-aprendizaje de la bioquímica, y se reduce aún más al inmiscuir a la bioinformática como filtro. Por lo que resulta un justificativo de cómo este trabajo realizará un aporte a nivel teórico al campo didáctico del uso de herramientas bioinformáticas en la enseñanza-aprendizaje de la bioquímica bajo el marco del ABI y también al campo aplicativo por la propuesta de material didáctico junto con sus posibles formas de evaluación.

Teniendo en cuenta este contexto, se plantea un escenario general sobre el estudio de este tipo de aprendizaje, inicialmente, desde el marco internacional, se encuentra el trabajo de Peñaherrera, M., Chiluzza, K. y Ortiz, A. (2014, titulado: “Inclusión del Aprendizaje Basado en Investigación (ABI) como práctica pedagógica en el diseño de programas de postgrados en Ecuador. Elaboración de una propuesta”. En este trabajo, el objetivo principal fue el diseño académico de un programa curricular de postgrado con enfoque ABI. La población seleccionada estuvo conformada por algunas universidades de Ecuador, cuyo interés se centra en mejorar el enfoque ABI de sus planes curriculares de maestría. De este trabajo, se considera importante que el ABI plantee al estudiante como un sujeto activo de su aprendizaje, ligado a una visión mucho más constructivista. Además

de esto, una de las conclusiones a las que llega el artículo es que no es suficiente con plantear el plan curricular desde este enfoque, sino que además resulta imperioso el incorporarlo a las prácticas pedagógicas de los docentes. Ya que permite a su vez desarrollar competencias investigativas que se traducen en un planteamiento reflexivo de sus prácticas pedagógico-didácticas. También, a partir de este artículo se toma el enfoque de ABI que se tomará para el desarrollo del presente trabajo.

Nuevamente, desde un referente internacional, se plantea el estudio presentado por Rodríguez, Claudio & Ortega, Juan. (2014) titulado: “Evaluación del sistema de aprendizaje basado en la investigación (SABI) en la unidad bioquímica del CICS UMA IPN”. Este estudio se realizó con cuatro generaciones (del 2008 al 2012) de la carrera de medicina de la Unidad Milpa Alta del Instituto Politécnico Nacional de México, especialmente en la implementación de la unidad de aprendizaje de Ciencias Básicas del Aparato Cardiovascular. El objetivo de este es utilizar el ABI como un detonante del aprendizaje para evitar que los estudiantes reprueben este espacio académico. Además, plantean que esta alternativa de enseñanza-aprendizaje funciona bien en grupos numerosos de estudiantes lo que representa una ventaja para no disminuir el nivel académico en grupos grandes. Lo anterior, está directamente relacionado con el papel activo del estudiante en su propio proceso, y también las ventajas de las herramientas tecnológicas en dichos procesos.

En cuanto al referente local se presenta el trabajo desarrollado por Contreras, G. A. G., Ospina, Y. L. (2008), titulado: “Desarrollo de competencias científicas a través de una estrategia de enseñanza y aprendizaje por investigación”. Este trabajo fue diseñado con el objetivo de plantear proyectos de investigación escolar que inmiscuyan en el aula a docentes y estudiantes en las actividades que constituyen el ejercicio investigativo como la toma de decisiones, la innovación y la comunicación de resultados. El aporte de este trabajo a este proyecto es la visión de la necesidad de plantear un contexto de la vida real o que presente una problemática para poder desarrollar las competencias investigativas en los estudiantes. Además de presentar los aportes de un docente investigador en su ejercicio docente, que son reflejo de su dominio disciplinar, pedagógico, didáctico, histórico y epistemológico.

## Referentes conceptuales

Como se postuló en la introducción el eje articulador en cuanto a lo conceptual, tanto pedagógico-didáctico como disciplinar, está determinado por tres líneas teóricas principales. La primera, las competencias investigativas, en este caso enfocadas en la competencia que se pretende fortalecer que es: “saber utilizar programas específicos de su campo profesional”. La segunda, la bioinformática, planteando a sus herramientas como posible recurso didáctico en el desarrollo de actividades de aplicación como el docking molecular. La tercera, presentando al enfoque utilizado para el planteamiento de las actividades: el aprendizaje basado en investigación (ABI). Además, se considera pertinente, especificar a modo de contexto las generalidades en torno a la Leucemia Mieloide Crónica (LMC), enfermedad utilizada como contexto, y su relación con la extracción de aceite esencial de semilla de mora para la posterior extracción del alfa tocoferol. Teniendo en cuenta lo anterior, se presentan en esta sección las definiciones y características principales de estas líneas.

### Competencias investigativas

La definición de competencia se refiere a la capacidad de un sujeto de hacer uso de sus conocimientos a la hora de enfrentarse a problemas teóricos o de la vida cotidiana. Así pues, las decisiones que tome para la solución de estos estarán ligadas no solo a su conocimiento teórico, sino también a cuestiones morales y principios éticos que conforman su individualidad (Rocha, 2012). En consonancia con esta definición se encuentra la definición postulada por Moreno (2012) quien considera que las competencias no solamente se refieren al uso del conocimiento, sino a una movilización de todos aquellos recursos psicosociales de los sujetos en pro de la resolución de situaciones complejas. Por lo que, un sujeto competente es aquel que a partir de una lectura de su entorno compromete todo su bagaje como individuo para encontrar no solo posibles respuestas, sino metodologías, planes de ejecución, procesos que le brinden múltiples alternativas a sus problemas.

Así que, desde la perspectiva de Álvarez, 2008, citado en Moreno (2012), se considera que el concepto de competencias es el conjunto de saberes relacionados con la articulación teórico-práctica del conocimiento y una profunda reflexión sentada en los saberes cognitivos, pero también en aquellos que responden a situaciones sociales, como las habilidades sociales, afectivas y comunicativas. Por tanto, es la interacción de este conjunto lo que puede describir el actuar de un sujeto frente a un problema y lo que habla de su nivel de competencia. Pero ¿qué tipo de competencias existen? Hay un sinnúmero de competencias en los diferentes ámbitos de la vida y en el ámbito educativo, por ejemplo, desde el plan de estudios de la UPN y Licenciatura en Química (2018), se plantea que a lo largo de la carrera el docente en formación puede adquirir cuatro tipos de competencias fundamentales para su ejercicio: básicas, procedimentales, científicas e investigativas -Véase la tabla 1-. Este conjunto de competencias tiene un objetivo esencial y es que el docente pueda transformar las realidades educativas a las que se aproxima y en el caso puntual

de las competencias investigativas el departamento hace un énfasis en que serán desarrolladas en torno a la didáctica de las disciplinas.

### Figura1

*Estructura del Programa de Licenciatura en Química con relación a la formación de competencias, por semestre, ciclos y componentes de formación.*

SEMESTRES	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X
Ciclos →	Fundamentación					Profundización				
Fase de formación ↓	Competencias Básicas (C.B) / Competencias Generales / Capacidades del Educador									
De Fundamentos Generales										
De saberes Específicos y Disciplinarios	Competencias Procedimentales (C.P) / Capacidades del Educador									
De pedagogía	Competencias Científicas (C.C) / Capacidades del Educador									
De Didáctica de las Disciplinas	Competencias Investigativas (C.I) / Capacidades del Educador									

Tomado de: UPN & Licenciatura en Química (2018).

Considerando entonces que dentro del perfil del egresado también se contempla que el licenciado sea un líder investigativo de no sólo los procesos educativos pedagógicos y didácticos de la química sino también de las ciencias ambientales y la tecnología de la química. Para conseguir este objetivo, el departamento reconoce a las actividades investigativas en el área de conocimiento, tanto pedagógico como disciplinar, como la forma de contribuir al desarrollo de la ciencia. Lo anterior, se posibilita en tanto que el docente atienda las necesidades de diseño, implementación y evaluación en ciencias. Por lo que se requiere que él mismo, en ese proceso de atención explore de manera continua nuevos modelos didácticos (UPN & Licenciatura en Química, 2023). Por lo que desde la visión del departamento las competencias investigativas resultan un determinante positivo en el ejercicio docente y su impacto en las aulas.

En ese sentido, en el caso particular de las competencias investigativas se definen según la perspectiva de Salas-Perea, 2005 y Tobón 2013 citados en Hernández, et al. (2019), como conductas o actitudes que el profesional asume desde sus medios conceptuales, reflexivos, críticos, sociales y afectivos para enfrentar y resolver problemas de su campo de acción profesional. De manera que, las competencias investigativas se ciñen al ejercicio investigativo en un campo de acción determinado del profesional, en este caso del docente. En ese sentido, como lo mencionan Marrero y Pérez (2014), las competencias investigativas en los docentes les permiten introducirse

en la generación o el fortalecimiento de conocimiento en un campo de su preferencia que, por supuesto, impacte en las aulas en las que ellos hagan presencia, incluso mediante la inclusión de sus estudiantes como sujetos activos.

Por lo que las competencias investigativas en la acción docente, según Estrada, 2014 citado por Nuñez (2019) requieren cuatro criterios fundamentales a incorporar para su desarrollo:

1. Sus habilidades cognitivas y metacognitivas, pero también sus motivaciones e intereses para obtener un buen desempeño en las investigaciones que encabeza.
2. Sus relaciones laborales, para que interactuando con pares académicos se propenda por tener interacciones que generen construcciones de tipo académicas-investigativas-laborales.
3. Debe incorporar las dinámicas metodológicas propias de la investigación científica.
4. Debe incorporar a un equipo de trabajo, interdisciplinariedad y relaciones interpersonales que aporten y cuestionen sus planteamientos, para que se genere una mejor construcción del conocimiento.

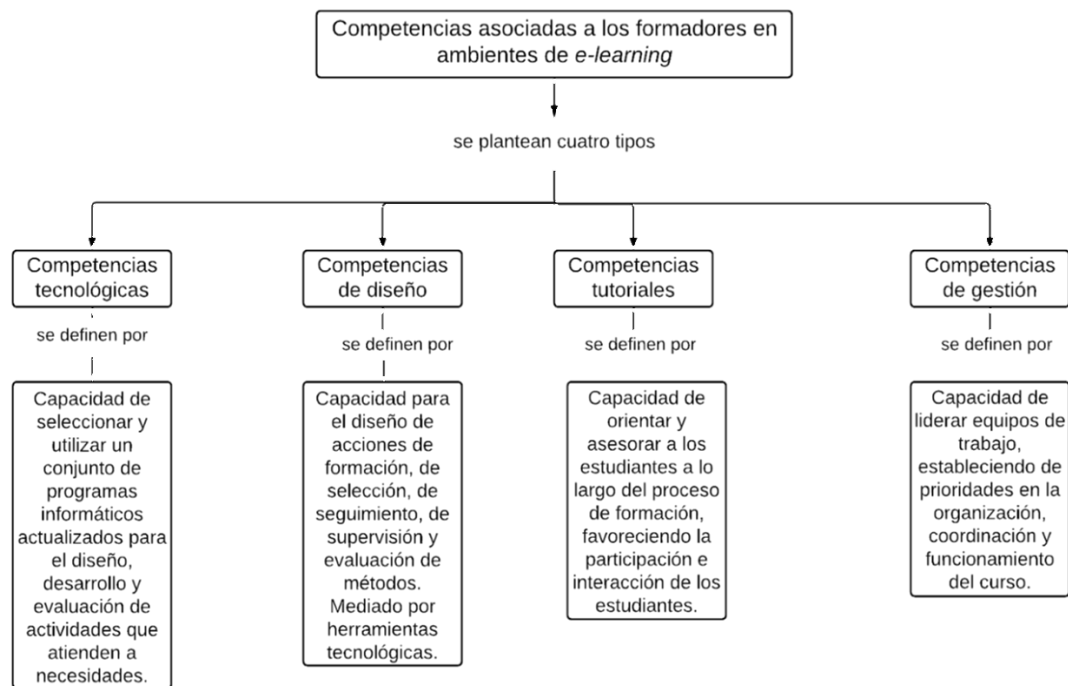
Teniendo en cuenta la visión de Nuñez (2019) para la selección de la competencia a trabajar se tuvo en cuenta que fuese un tema de interés en la materia de Bioquímica, por lo que se presenta un contexto en el que se ahondará en un próximo apartado. Además de proponerse actividades en grupo que permitan las construcciones académicas y el trabajo en equipo. Puesto que este último, genera aportes y cuestionamientos vitales para el fortalecimiento o desarrollo de una competencia. Asimismo, contemplando los nuevos retos educativos producto de los avances tecnológicos y la presencia de nativos digitales en las aulas, se hace necesaria una adaptación de las competencias investigativas enfocadas en el uso de las TIC's, ya que la incorporación de éstas como potenciales herramientas pedagógicas es una de las principales búsquedas del PNDEN.

Un aspecto relevante de esta adaptación que deben realizar los docentes al enfrentar dichos retos es el enfrentarse como aprendices a las TIC. Puesto que, al estar forzados a modificar sus metodologías pedagógico-didácticas para integrar herramientas tecnológicas, deben primero dominarlas para posteriormente realizar la reflexión pedagógica sobre sus posibles aplicaciones en el aula. Lo que desde la visión de Burbules, dota al docente de múltiples dimensiones, pues éste se desenvuelve en roles como aprendiz, diseñador y ya en la aplicación, como director. Como resultado, este tipo de ejercicios de adaptación son entonces una oportunidad de aprendizaje, crecimiento y desarrollo para el docente (2012, p.12).

En consecuencia, los docentes deben adaptar sus metodologías e incluso, su modelo pedagógico-didáctico para estar en consonancia con los retos educativos actuales. Por esto, Mendoza propone en su tesis de Maestría que el docente debe entonces ganar competencias de tutor *e-learning* en la transición hacia modelos virtuales. Lo que desde su perspectiva implica cambios profundos en la concepción de la enseñanza-aprendizaje y en las metodologías de aproximación al conocimiento (2012, p.27). En ese sentido, Mendoza propone cuatro posibles dimensiones en las que se puede ver envuelto el docente en su papel de mediador de TIC: Las competencias tecnológicas, las competencias de diseño, las competencias tutoriales y las competencias de gestión –véase figura 1-.

**Figura 2**

*Competencias asociadas a los formadores en ambientes de e-Learning*



Fuente: construcción propia con información tomada de Martínez, M., & Wilson, O., (2012). Este diagrama presenta la clasificación de las diferentes competencias asociadas a los formadores en ambientes de e-learning y cómo se definen.

De estas cuatro posibles competencias que se podrían desarrollar, se seleccionan entonces las competencias tecnológicas en vista que éstas se encuentran en consonancia con el objetivo. Las competencias tecnológicas están determinadas por la capacidad de dominar softwares informáticos y herramientas en la web, pero no sólo como un instrumento técnico, sino como una herramienta pedagógico-didáctica que se puede integrar en el diseño, desarrollo y evaluación de actividades mediadas por ambientes tecnológicos. Por tanto, hay que tener en cuenta que las herramientas al estar en constante actualización en sus versiones requieren un compromiso en la renovación de estrategias por parte del docente. (Mendoza, 2012, p.30).

En tal sentido, reconociendo la amplitud de las competencias tecnológicas, se propone que primero los docentes en formación sean aprendices para luego realizar un ejercicio en el que ellos proponen una actividad mediada por las herramientas bioinformáticas reconocidas en las sesiones, lo que confluye con la visión de Burbules (2012). Puesto que como se mencionó anteriormente, esta es una oportunidad para fortalecer en primera medida el aprendizaje o reconocimiento, en este caso, de herramientas para su desempeño como profesionales. En segunda medida, como un espacio de reflexión didáctica en el que deben proponer una actividad para la enseñanza de una temática de bioquímica que sea mediada por alguna de las herramientas bioinformáticas vistas en las sesiones.



Conviene subrayar que la competencia investigativa seleccionada para fortalecer es: “Saber utilizar programas informáticos específicos de su campo profesional”. (Mendoza,2012: p.27). por En vista que, esta competencia tiene una alta potencialidad didáctica, ya que el dominio de los softwares específicos podría favorecer las propuestas metodológicas en el aula y consecuentemente podría impactar el proceso de enseñanza-aprendizaje, lo que se traduciría en innovación educativa. Además, que la perspectiva de Burbules (2012) como Mendoza (2012) coinciden en que: “aquellos docentes que han tenido experiencia en el modelo *e-learning*, pero en el rol de estudiante (...) permite al tutor la implementación de mejores estrategias de enseñanza y aprendizaje en el ambiente virtual (p.90)”

Considerando la competencia seleccionada se plantean los indicadores del saber técnico en cuanto al dominio programas o softwares desde la visión de Fandos (2003):

- Reconocer el entorno del software y sus herramientas básicas.
- Dominar las herramientas básicas comprendiendo sus funciones dentro del entorno del software.
- Comprender cómo utilizar las herramientas para desarrollar tareas simples o resolver problemas.

Además, todos los indicadores mencionados anteriormente asociados a la competencia seleccionada se pondrán a prueba mediante la propuesta de actividad que deben realizar los docentes en formación como actividad de cierre. Puesto que, esta será un reflejo que contempla si el docente en formación es “Capaz de apreciar la base del aprendizaje on-line y el potencial de la web y de Internet para el aprendizaje” (Fandos, 2003, p.203). Lo que se traduciría en un impacto en sus prácticas didácticas e incluso pedagógicas. Puesto que, se tiene en cuenta que al desarrollar actividades para fortalecer una competencia específica como segundo efecto se pueden desarrollar diversas competencias simultáneamente, entendiendo los fines de este proyecto, se limita la evaluación exclusivamente a la competencia escogida y su posible impacto.

## **Bioinformática**

La bioinformática es una subdisciplina científica que ha cobrado protagonismo en el último siglo y cuya proyección va en aumento. En especial, gracias a su aporte investigativo en la emergencia sanitaria provocada por el SARS-CoV-2. En consecuencia, se ha desencadenado un interés disciplinar, puesto que su objetivo principal es la aplicación de herramientas bioinformáticas y computacionales que permiten un manejo óptimo de datos biológicos (ISCIII, 2020). La definición más disciplinar de la bioinformática, es postulada por la NIH de las siglas en inglés *National Human Genome Research Institute* que la postula “como una subdisciplina científica que implica el uso de ciencias informáticas para recopilar, almacenar y analizar y disseminar datos e información biológicos, como secuencias de ADN y aminoácidos o anotaciones sobre esas secuencias” (National Human Genome Research Institute, 2022).

Sin embargo, la bioinformática ha despertado el interés de los docentes de áreas como la biología, la química o la bioquímica por sus potencialidades a nivel didáctico. Como se puede evidenciar desde la perspectiva de Pérez et, al. (2008) que propone a la bioinformática como una herramienta

didáctica que resulta táctica en los procesos de aprendizaje. Debido a que requieren de un tratamiento y análisis de información de carácter biológico que implican el uso de herramientas informáticas lo que puede favorecer espacios innovadores para la enseñanza de la bioquímica, como lo reportan Rodríguez Cepeda, R., & Cortés Parra, M. J. (2021) quienes apelan a que la vinculación de las herramientas bioinformáticas en las clases de química y bioquímica favorecen el aprendizaje de estas asignaturas.

Una de las implementaciones más comunes de la bioinformática ha sido el uso de bases de datos, sobre todo en niveles de secundaria, puesto que las herramientas bioinformáticas ayudan en la comprensión de conceptos de base de la bioquímica como proteína y aminoácido (Martínez-Vaz, 2014). En la tabla 2, se pueden observar los enlaces para algunos de los recursos virtuales y bases de datos de utilidad que se pueden encontrar para la enseñanza de Bioquímica mediadas por herramientas bioinformáticas. Las herramientas plasmadas en la tabla 2 hacen parte de un compendio de herramientas que pueden ser usadas en diferentes niveles educativos y que, aunque no son diseñadas para su uso en la educación, están siendo reconocidas por su adaptabilidad y resultados en la asimilación, comprensión y construcción de conceptos en bioquímica.

**Tabla 2**

*Links para recursos virtuales y bases de datos de utilidad para la enseñanza de Bioquímica*

<b>Base de datos o recurso virtual</b>	<b>Dirección cibernética</b>
Enciclopedia de Genes y Genomas de Kyoto (KEGC)	<a href="http://www.genome.jp/kegg/">http://www.genome.jp/kegg/</a>
Base de datos BioCyc	<a href="http://biocyc.org">http://biocyc.org</a>
BLAST. Centro Nacional de Información en Biotecnología (NCBI)	<a href="https://nihlibrary.ors.nih.gov/bioinfo/BLAST/Blast.htm">https://nihlibrary.ors.nih.gov/bioinfo/BLAST/Blast.htm</a>
Banco de Datos de Estructuras de Proteínas (PDB)	<a href="https://www.rcsb.org/?ref=nav_home">https://www.rcsb.org/?ref=nav_home</a>
Estructuras Centro Nacional de Información de Biotecnología (NCBI)	<a href="https://www.ncbi.nlm.nih.gov/guide/domains-structures/">https://www.ncbi.nlm.nih.gov/guide/domains-structures/</a>
Dominos de proteínas- Centro Nacional de información en Biotecnología (NCBI)	<a href="http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/cdd/cdd.shtml">http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/cdd/cdd.shtml</a>
Base de Datos de Biocatálisis y Biodegradación de la Universidad de Minnesota	<a href="http://umbbd.ethz.ch">http://umbbd.ethz.ch</a>

Fuente: (Martínez-Vaz, 2014)

En el caso de Martínez-Vaz (2014) trabajando con alumnos de secundario y usando a las herramientas de manera introductoria en la enseñanza de conceptos como: proteína y aminoácidos. A nivel universitario, en cursos de bioquímica de la Licenciatura en Química, se encuentra el caso del trabajo de Rodríguez Cepeda, R., & Cortés Parra, M. J. (2021) quienes proponen una serie de

actividades que también incluyen al PDB como herramienta inicial. Sin embargo, se integran otras herramientas como Psipred y Uppsala server. Esta actividad se realiza bajo el contexto del SARS-Cov2 y los autores afirman como parte de sus conclusiones que:

“El uso de herramientas bioinformáticas como apoyo para la enseñanza de conceptos asociados a las proteínas permiten mejorar la asimilación de estos conceptos, a los cuales se les reconoce su alto nivel de complejidad y de abstracción, y que resultan de gran dificultad para ser entendidos por parte de los estudiantes. Adicionalmente, el uso de estas herramientas permite fortalecer las habilidades de consulta, manejo de bases de datos y análisis de información bioquímica actualizada, además de propiciar un ambiente de aprendizaje interesante para los estudiantes (Rodríguez Cepeda, R., & Cortés Parra, M. J., 2021, p.17)”

Dicho de otra manera, las herramientas bioinformáticas arrojan aportes significativos cuando son integradas como estrategias didácticas y aportan no sólo a la construcción de conceptos complejos, sino también a fortalecer habilidades investigativas como la consulta, el análisis y la interpretación de datos. Por lo que, bajo esta concepción, se seleccionan para el desarrollo de este trabajo herramientas como: PyRx, Avogadro, Chimera UCSF además de bases de datos como PDB y PubChem. Las anteriores herramientas fueron seleccionadas con base a la aplicación de la bioinformática que se seleccionó: Docking o acoplamiento molecular.

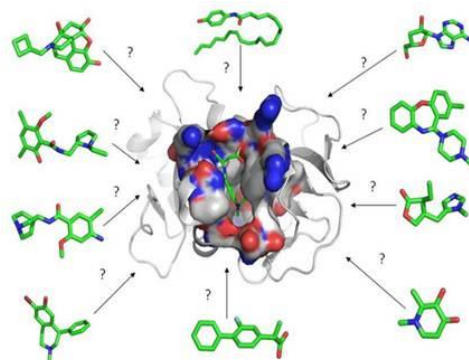
### ***Docking***

La bioinformática tiene múltiples aplicaciones, entre las cuales se encuentran: La genómica funcional, genómica comparativa, el alineamiento de secuencias de aminoácidos, la visualización de estructuras, predicción de estructuras, ensamblaje de secuencias, análisis filogenéticos, diseño de fármacos y terapia génica. El acoplamiento molecular del inglés “docking” es un método bioinformático para la búsqueda y tamizaje de ligandos basados en su estructura y determinar su actividad biológica para su posterior aprovechamiento en blancos terapéuticos. Los ligandos son moléculas pequeñas, pueden ser hormonas, neurotransmisores, fármacos o compuestos aislados. En este caso, el alfa tocoferol aislado del aceite esencial de semilla de mora. Los blancos terapéuticos son moléculas de mayor tamaño como el ADN, el ARN o las proteínas (Ballón Paucara y Grados Torrez, 2019).

En la figura 2, se puede observar cómo el docking permite predecir la interacción entre un ligando (un fármaco) y su blanco terapéutico (una proteína). Esta relación se puede denominar conformación ligando-blanco y es calculada de manera computacional determinando cuál de las múltiples posiciones cuenta con mayor estabilidad, especificidad y favorabilidad. Para luego con base en esos criterios predecir su actividad biológica, lo que en la industria farmacéutica se traduce en el medicamento más efectivo para el tratamiento de una enfermedad (Ballón Paucara & Grados Torrez, 2019).

### Figura 3

*Posibles posiciones y conformaciones de un ligando al interactuar con un blanco proteico*



Nota: Imagen tomada de (Ballón Paucara & Grados Torrez, 2019)

En la figura 2, se representa de manera gráfica también la forma en la que operan sus algoritmos. El primero, se encarga de predecir todas las configuraciones estructurales posibles del ligando, que son todas aquellas posiciones factibles en que la molécula se puede encontrar. El segundo algoritmo genera predicciones energéticas con una puntuación asignada a cada una de las posibles configuraciones ligando-proteína y propone a la más estable energéticamente. Para el caso de la figura 2 tendríamos 10 posibles configuraciones ligando-proteína. Evaluando el conjunto, se obtiene la mejor configuración que cumpla con ser la más estable energéticamente (Phatak et al., 2009 citado por Ballón Paucara & Grados Torrez, 2019).

### *Contexto en que será usado el docking o acoplamiento molecular*

El contexto en el que se desarrollan las actividades con las herramientas bioinformáticas es el uso de compuestos bioactivos extraídos de aceites esenciales. Estos aceites son producto del aprovechamiento de desechos alimentarios, en este caso, la semilla de mora, para su posterior aprovechamiento en el tratamiento de la LMC. En ese sentido, este apartado se encargará de presentar el contexto en el que estarán enmarcadas las actividades que serán mediadas por diversas herramientas bioinformáticas y bases de datos.

En primer lugar, los compuestos bioactivos pueden ser encontrados en pequeñas cantidades en frutas, verduras, plantas, nueces, aceites y granos integrales. En nuestro organismo, son compuestos que cumplen funciones que pueden prevenir problemas de salud o mejorarlos. Es por esto por lo que los investigadores han puesto su mirada en ellos para el tratamiento de enfermedades como el cáncer (NCI, 2011). Contemplando entonces que se encuentran compuestos bioactivos en aceites, se planteó la selección de un posible residuo alimenticio del que se pudiese extraer un compuesto bioactivo para su posterior aprovechamiento.

En segundo lugar, en cuanto a la selección del residuo alimenticio se propuso a la semilla de mora, puesto que se puede considerar fácilmente, ya que hace parte de los residuos generados en los hogares colombianos sobre todo en la preparación de jugos que acompañan las comidas. Sin embargo, el contexto dado en las actividades está inclinado hacia los volúmenes producidos a nivel industrial, teniendo en cuenta las cifras presentadas por Pantoja-Chamorro et., al, quienes realizaron un estudio a la empresa Industria de Productos Agroindustriales de Nariño (INPADENA) en el municipio de Pasto (Nariño). Ya que este departamento se encuentra entre los principales productores de mora con 5.677,5 toneladas anuales, de las cuales el 70% (3974,25 toneladas aproximadamente) son residuos. Los residuos son mayoritariamente semillas y como las industrias colombianas se han centrado únicamente en el aprovechamiento de la pulpa (para la preparación de jugos, mermeladas, conservas) no cuentan con la infraestructura para el aprovechamiento de las semillas (2017, p.36). En ese sentido, para optimizar a la materia prima y eludir el desaprovechamiento de las semillas se propone la extracción del aceite esencial de semilla de mora. Lo que favorecería no sólo a la industria sino también y como segundo efecto reduciría su impacto ambiental como residuo.

Con relación a la metodología seleccionada, se les presenta a los docentes en formación la propuesta por Pantoja-Chamorro et., al para la extracción del aceite esencial de semilla de mora realizada con fluidos supercríticos bajo diferentes condiciones de presión y temperatura. Posteriormente, se les presenta el análisis realizado por los investigadores respecto a los diversos compuestos del aceite, en el que se encontraron principalmente ácidos grasos, esteroides y tocoferoles. Considerando la tabla 3, se observa que los tocoferoles que se obtuvieron en mayor proporción fueron el alfa y el  $\gamma$ -tocoferol. Además, los autores señalan que este aceite en comparación por ejemplo con el aceite de oliva es una fuente prometedora de tocoferoles de fuente natural (2017, p.41).

**Tabla 3**

*Contenido de tocoferoles (mg/kg) en aceite de semillas de mora extraídos con CO2 supercrítico*

Condición P(bar)-T(°C)	$\delta$ -tocoferol	$\gamma$ -tocoferol	$\alpha$ -tocoferol	Tocoferoles Totales
	mg/kg aceite			
200-40	492,1	4899,4	941,4	6332,9
200-60	1123,2	8183,6	1315,8	10622,6
275-50	492,1	5134,8	770,2	6397,1
350-40	374,4	3637,1	534,9	4546,4
350-60	374,4	4150,6	588,4	5113,4

Nota: Extraído de Pantoja-Chamorro, Ana L, Hurtado-Benavides, Andrés M, & Martínez-Correa, Hugo A. (2017).

Considerando entonces como criterio de selección el aprovechamiento de las semillas como fuente de tocoferoles y evaluando las proporciones de estos, se realizó una búsqueda de los posibles usos

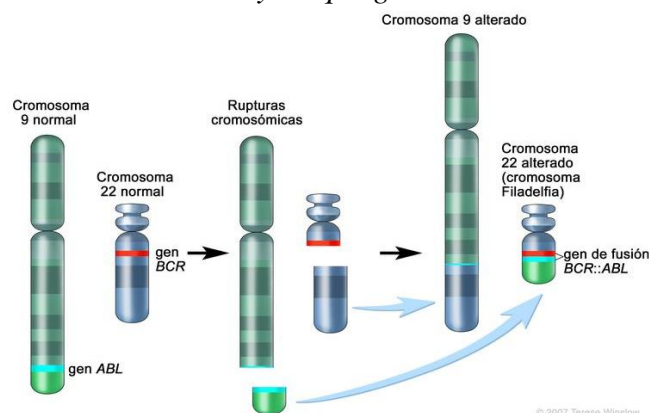
que han tenido estos dos compuestos para el tratamiento de enfermedades. Producto de esa búsqueda, se encontró el estudio realizado por Calvo Álvarez (2020) en el que se propone al  $\alpha$ -tocoferol como potencial agente terapéutico para el tratamiento de la LMC.

En ese sentido, se les presenta a los estudiantes un fragmento de la tesis de maestría presentada por Calvo en el que describe cómo la regulación del estrés oxidativo (EO) puede ser una promisorio metodología para el tratamiento de la LMC. Puesto que, al incorporar moléculas antioxidantes, se puede aumentar la producción de especies reactivas del oxígeno y éstas a su vez generan unas vías de señalización que favorecen la muerte de las células cancerosas. En vista que, uno de los criterios que les permite mantener a las células su malignidad es la evasión de la muerte celular regulada (apoptosis). Concretamente, se propone el uso del TPGS (D-  $\alpha$ -tocoferol polietilenglicol 1000 succinato) pues esta molécula ha generado buenos resultados como potencial antitumoral para el tratamiento de la LMC (Calvo Álvarez, 2020). Por lo que se selecciona al alfa-tocoferol como ligando para realizar la prueba de acoplamiento molecular para evaluar su actividad biológica y su potencialidad como fármaco. Lo anterior, para presentar los posibles impactos que puede tener el aprovechamiento de desechos alimentarios y las potencialidades de la bioinformática a nivel disciplinar.

Para la selección del blanco proteico se realizó una indagación sobre la LMC y sus orígenes genéticos. Esta enfermedad se caracteriza por una sobreproducción de glóbulos blancos por parte de la médula ósea. La mayoría de los pacientes que padecen esta enfermedad presentan al cromosoma Filadelfia. Un cromosoma anormal (mutación) producido a partir de la traslocación de ciertas secciones de los cromosomas 9 y 22, éstos al intercambiar lugares producen el gen de fusión BCR-ABL, que codifica a su vez el denominado cromosoma Filadelfia, como se puede observar en la figura 3.

#### Figura 4

*Proceso de mutación de los cromosomas 9 y 22 que genera el cromosoma Filadelfia*



Nota: Imagen extraída de (NCI, 2023)

El cromosoma Filadelfia, como lo expresa Calvo Álvarez se expresa como la proteína de fusión BCR-ABL. Esta proteína presenta función tirosina-quinasa, que consecuentemente produce la fosforilación de blancos celulares que se asocian directamente a la formación inicial y crecimiento

de tumores. Por lo que se ha considerado como blanco importante para el tratamiento de la LMC (2020). Contemplando entonces la investigación de Calvo se selecciona entonces a la proteína BCR-ABL para que sea utilizada en el proceso de acoplamiento molecular. Anexo a esto, se realiza una búsqueda de posibles tratamientos que se estén llevando a cabo para comparar el rendimiento del alfa-tocoferol con el de fármacos ya probados en el tratamiento de la LMC.

Para la selección de otros posibles inhibidores se toma en cuenta el trabajo realizado por Gomari., et al, (2021) en el que proponen tres compuestos candidatos para el tratamiento de la LMC y los comparan con el Ponatinib, que actualmente es el medicamento más efectivo para la inhibición de la proteína BCR-ABL. Los compuestos son: PBA2, CD-200 and JNJ-26854165. En ese sentido, se propone que se realice el docking o acoplamiento molecular, con el alfa-tocoferol, el Ponatinib y los otros compuestos para poder hacer un mejor ejercicio de evaluación del impacto del compuesto bioactivo seleccionado. Lo anterior mediado por las herramientas PyRx, Chimera UCSF, Avogadro y las bases de datos PDB y PubChem.

### **Aprendizaje Basado en investigación (ABI)**

Según el Servicio de Innovación Educativa de la UPM, el Aprendizaje Basado en Investigación (ABI), del inglés *Research Based Learning*, propone la creación de espacios en los que los estudiantes puedan desarrollar o hacer parte de procesos de investigación. Por ejemplo, en la aplicación de una metodología para que ellos puedan realizar comprobaciones sobre sus hipótesis o para que por medio del acompañamiento y guía encuentren respuestas a preguntas planteadas en contextos determinados (2020). Asimismo, desde la perspectiva de Peñaherrera et al, se plantea al ABI como un modelo que permite a los estudiantes la construcción y apropiación de conocimientos. Pero no sólo teóricamente, sino también con habilidades relacionadas con el trabajo autónomo y el aprendizaje colaborativo (2014). Referente a la práctica docente, estas habilidades impactarán en la innovación educativa consecuentemente.

Desde la perspectiva de Plomp 2007 citado en Servicio de Innovación Educativa de la UPM (2020), las características principales del ABI se determinan según la función u objetivo de la investigación. Por lo que dependiendo de la aplicación seleccionada es necesario generar las respectivas adaptaciones a la metodología. Para los efectos de este trabajo se desarrollará una investigación-evaluativa, para determinar el impacto de un programa guía de actividades, que está en consonancia con el objetivo de este trabajo y que postulará a los estudiantes como sujetos capaces de realizar indagación y procesos investigativos desde dos roles diferentes: aprendices y como formuladores de posibles actividades que integren a las herramientas bioinformáticas, manteniendo así la visión de Burbules (2012) y Mendoza (2012).

Frente a esta postura, Peñaherrera, et al. (2014) en la Figura 4, presenta las relaciones entre estudiante y tipo de investigación, planteando como variables las estrategias y el enfoque del proceso. El diagrama considera también si está más enfocada en el aprendizaje de contenidos

teóricos o si los intereses del investigador están más arrojados a que los estudiantes desarrollen o fortalezcan sus habilidades investigativas.

En este sentido, las actividades que se desarrollarán para la implementación de este proyecto estarán concebidas de manera mixta entre dos tipos de ABI: investigación orientada y basado en la práctica, como se observa en la figura 4. En el que inicialmente, se propone el contexto de aislar al alfa tocoferol del aceite esencial de semilla de mora, que es un residuo alimentario, para plantear sus posibles usos farmacológicos en el tratamiento de la LMC mediante el acoplamiento molecular o docking. Posteriormente, se presenta el uso de las herramientas bioinformáticas y bases de datos mencionadas anteriormente, en el que los docentes en formación serían audiencia según la clasificación presentada en la figura 4 o aprendices desde la perspectiva de Burbules (2012) y Mendoza (2012). Hasta ese momento las actividades estarían enfocadas en la investigación orientada.

**Figura 4**

*Tipos de ABI según el papel del estudiante*



Fuente: Adaptación de Peñaherrera et al. (2014).

Finalmente, se propone en la actividad final que los docentes en formación propongan una actividad para la enseñanza de alguna temática de bioquímica en la que inmiscuyan una o más herramientas bioinformáticas. Ya en este segundo momento, tendrían un rol activo y propositivo que pertenece más a la visión de investigación basada en la práctica. En este ejercicio ellos deben buscar la forma de integrar la competencia fortalecida en su práctica docente.



## **Metodología**

### **Tipo de investigación**

La metodología bajo la que se va a desarrollar este trabajo es mixta. En ese sentido, se entiende a la investigación mixta, desde la perspectiva de Moscoso (2017) como una respuesta a un mismo objetivo metodológico que cuenta con resultados de tipo cuantitativo y cualitativo. Este tipo de investigaciones se pueden realizar con o sin grupo control, en este caso no se tomará en cuenta a un grupo control, sino que se realizarán pruebas de entrada y de salida para determinar el impacto en el mismo grupo, además de realizar un proceso de evaluación mediado por diferentes instrumentos de evaluación.

Según Creswell y Plano Clark 2011 citado por Moscoso (2017), para que una investigación sea considerada, con suficiente rigurosidad como mixta, debe contemplar estos dos aspectos principales:

1. Un proceso de recogida y análisis de datos (tanto cualitativos como cuantitativos) que respondan a los objetivos planteados y que contribuyan a contestar la pregunta problema.
2. Una interrelación entre los datos (cualitativos y cuantitativos) que permita generar análisis apoyados en los dos tipos de datos y que se sustenten en el marco teórico empleado.

En el caso del presente trabajo para el análisis de los datos tanto cualitativos como cuantitativos será procesado por softwares estadísticos. En el caso de los datos cualitativos, serán procesados por Atlas ti y para los datos cuantitativos se postula SPSS.

### **Población**

La muestra poblacional a la que se dirigió este programa guía de actividades fue al curso del semestre 2023-1 de "Sistemas bioquímicos" de la Licenciatura en Química de la UPN, conformado por 33 docentes en formación. Puesto que, este espacio académico hace parte del ciclo de profundización -como se puede observar en la tabla 1- . En este curso, la distribución de la población fue heterogénea en cuanto a los semestres que se encontraban cursando los integrantes, puesto que se encuentran: 45,4% de estudiantes de décimo semestre (15 estudiantes), 36,3% de noveno semestre (12 estudiantes), 12,2% de octavo semestre (4 estudiantes), y un 6,06% que corresponde a 2 estudiantes de sexto y séptimo semestre. Por lo que se contó con una muestra que estaba cursando en su totalidad el ciclo de profundización propuesto en la malla curricular del departamento. En este nivel, se presupone según esta misma organización que los estudiantes han desarrollado ciertas competencias de tipo procedimental, científico y también investigativas. Por lo que se considera, que esta población puede disponer de herramientas disciplinares y pedagógicas

para trabajar la competencia investigativa de interés: “saber utilizar programas informáticos específicos de su campo disciplinar”.

Anexo a esto, se realizó una encuesta sobre el nivel de inglés reportado. Según una autoevaluación realizada por cada uno de los estudiantes es de: A1 un 24% (equivalente a 8 estudiantes), A2 un 42% (14 estudiantes), B1 un 27% (equivalente a 9 estudiantes) y un 6,06% (equivalente a 2 estudiantes). Esta pregunta resultó relevante puesto que, al trabajar competencias, se suelen estimular de manera simultánea otras competencias. En este caso, como los softwares y la información que se trabajaron estaban en inglés, se espera que los estudiantes requieran de su conocimiento en la lengua para desenvolverse en las actividades, además de saber si resulta o no como un impacto positivo para los participantes del taller.

## **Fases de la investigación**

### ***Fase de planeación***

En esta fase se realizó una búsqueda bibliográfica que permitió definir una problemática para trabajar en torno a ella por medio de los objetivos planteados. Posteriormente, se realizó una búsqueda bibliográfica frente a los antecedentes de esta cohorte investigativa, en cuanto a la relación de la bioinformática y la enseñanza-aprendizaje de la bioquímica. Posteriormente, se consultaron los referentes conceptuales. Finalmente se trazó una posible metodología para desarrollar este trabajo que se concreta en el Programa Guía de Actividades.

### ***Fase de diseño***

En esta fase, se realizó el diseño de un programa guía de actividades compuesto de 4 sesiones. El objetivo de las actividades era recurrir a las herramientas bioinformáticas como recurso principal y que estas tuviesen un enfoque ABI. Entre las actividades que se pretende desarrollar se encuentra; la aplicación de una prueba de entrada y de salida respecto a los conocimientos de herramientas bioinformáticas, actividades de reconocimiento y uso de las herramientas, además del planteamiento de soluciones de una problemática con el uso de las habilidades adquiridas a lo largo de las sesiones.

### ***Fase de implementación***

En lo que concierne a la implementación las actividades se aplicaron en la clase de Bioquímica del semestre 2023-2 de la licenciatura en química de la UPN. Se desarrolló un taller de bioinformática en el que junto con un compañero nos enfocamos

en las herramientas bioinformáticas: El específicamente en DruLiTo. El desarrollo del taller, en el que se aplicó el programa guía de actividades propuesto en este trabajo fue posible gracias al

espacio brindado por el director del trabajo de grado quien posibilitó 4 sesiones de sus clases, dos sesiones de tres horas y dos sesiones de dos horas (10 horas de aplicación en modalidad presencial) en las que se pudieron desarrollar las siguientes sesiones:

### Sesión 1.

En la primera sesión, se desarrollaron las actividades que se presentan en la Tabla 4:

**Tabla 4**

*Actividades previstas para la primera sesión según el programa guía de actividades diseñado*

Programa guía de actividades								
Sesión	Tiempo	Actividad	Objetivo	Modalidad	Herramienta utilizada	Instrumento de evaluación	Modalidad de la actividad teniendo en cuenta el modelo de investigación ABI	Anexos
1	20 m	<b>Prueba de entrada</b>	Identificar los conceptos previos de los estudiantes en torno a la bioinformática, sus herramientas y aplicaciones.	Sincrónica / Individual	No aplica	Prueba de entrada aplicada por medio de Microsoft Forms.	No aplica	<b>Anexo 1.</b> Preguntas de la prueba de entrada.
	40 m	<b>Actividad de contextualización:</b> Diseño de una infografía con base en la lectura de los fragmentos de los artículos: 1. Fragmento extraído de: Sánchez-Martin, M., & Sánchez García, I. (2003). Inhibidores de BCR-ABL como un abordaje molecular de la leucemia mieloide crónica. 2. Fragmento extraído de: Calvo Álvarez, J. C. (2020). Estudio del efecto del D- $\alpha$ -tocoferol polietilenglicol 1000 succinato (TPGS) como potencial agente terapéutico en el tratamiento de la leucemia mieloide crónica.	1. Identificar las causas genéticas que desencadenan a la LMC. 2. Presentar en una infografía la relación entre la LMC, la extracción de alfatocoferol y el uso de este extracto como posible tratamiento de la LMC.	Sincrónica/ Grupo	Se sugiere la utilización de Canva para la realización de la infografía.	Rúbrica de evaluación para infografías. Tomada y modificada de: Irma Antonio Mendez. 27 de nov de 2015. Rúbrica para evaluar infografía.	No aplica	<b>Anexo 2:</b> Guía Leucemia Mieloide Crónica: Origen genético de la enfermedad.
	30 m	<b>Socialización de la infografía</b>	1. Exponer la relación entre la Leucemia Mieloide crónica, la extracción del alfatocoferol de la semilla de la mora y el posible tratamiento de la enfermedad por medio de este extracto. 2. Presentar los objetivos del taller y su relación con la clase de bioquímica.	Sincrónica/ Grupo	Se utiliza el Anexo 2. Infografía sobre la LMC y su relación con la extracción de alfatocoferol para su posible tratamiento.	No aplica	No aplica	<b>Anexo 3:</b> Infografía sobre la LMC y su relación con la extracción de alfatocoferol para su posible tratamiento.
	90 m	<b>Presentación Dogma Central de la biología molecular:</b> Se plantea en esta presentación una explicación de procesos como la traducción y la transcripción del ADN.	El objetivo es presentar al dogma central de la biología molecular puesto que este es un eje articulador en el que se asienta la bioinformática en cuanto a la base conceptual.	Sincrónica/ Grupo	Se utiliza una presentación de diapositivas.	No aplica	No aplica	

Fuente: Elaboración propia.

Por lo que la primera sesión se dedicó en un principio a realizar la prueba de entrada cuyas preguntas se encuentran en el Anexo 1. Posteriormente los docentes en formación debían realizar la lectura de los fragmentos dispuestos en la Guía de Leucemia Mieloide Crónica (Anexo 2) en los que desde la mirada de Calvo Álvarez (2020) y Sánchez-Martinez & Sánchez-García (2003) se discuten los aspectos genéticos de la enfermedad y se propone al alfa tocoferol extraído del aceite esencial de semilla de mora como un posible agente terapéutico para el tratamiento de la LMC para que finalmente los docentes en formación propongan una infografía que sería socializada

posteriormente. Posterior a la socialización, se realizó una explicación de las relaciones para que se tuviesen en cuenta como hilo conductor en el desarrollo de las posteriores sesiones. Finalmente, se realizó una presentación del dogma central de la biología molecular para realizar una ampliación sobre conceptos para tener en cuenta puesto que el dogma central de la biología molecular es de vital importancia para el desarrollo de las temáticas.

Posteriormente, se dejaron dos actividades para desarrollar de manera asincrónica en la plataforma Moodle en la que se realizó un montaje de todo el material del taller y que fue posible gracias a la generosidad del profesor Rodrigo que nos facilitó un espacio en la sección Bioquímica. Las actividades asincrónicas están descritas en la Tabla 5.

**Tabla 5**

*Actividades asincrónicas desarrolladas posterior a la primera sesión*

Actividad	Tiempo	Actividad	Objetivo	Modalidad	Herramienta utilizada	Instrumento de evaluación	Modalidad de la actividad teniendo en cuenta el modelo de investigación ABI	Anexos
Actividad asincrónica:	20 m	1. Observar el video: Introducción a la bioinformática. 2. Traer preguntas y tomar notas.	El objetivo es presentar a grandes rasgos el objeto de estudio de la bioinformática, el tipo de datos en que está interesado, un rastreo histórico de la bioinformática, requerimientos para aprender bioinformática, algunas de las aplicaciones más relevantes y una introducción a las bases de datos.	Asincrónica /individual	Video: <a href="https://youtu.be/gSOTr2WxjQY?si=2TIH20lsp1_QehWS">https://youtu.be/gSOTr2WxjQY?si=2TIH20lsp1_QehWS</a>	No aplica	Investigación orientada	Anexo 4: Código QR y link para acceder al video "Introducción a la bioinformática"
Actividad asincrónica:	20 m	1. Observar el video: ¿Cómo seleccionar proteínas en el PDB? 2. Traer preguntas y tomar notas.	El objetivo es presentar a las bases de datos que se utilizarían en el proceso de Docking molecular: PDB y PubChem. En ese sentido, además de brindar una tutoría en el entorno básico y las herramientas más conocidas de la base de datos, el video presenta cómo se debe seleccionar una proteína de manera adecuada para realizar docking molecular y cómo descargarla. Además se presenta también el ambiente de Pubchem y la manera de buscar/codificar.	Asincrónica /individual	Video: <a href="https://youtu.be/ACV9PF4fWss?si=x4g3gBd2vHaedbl3">https://youtu.be/ACV9PF4fWss?si=x4g3gBd2vHaedbl3</a>	No aplica	Investigación orientada	Anexo 5: Código QR y link para acceder al video "¿Cómo seleccionar proteínas en el PDB?"

Fuente: Elaboración propia.

Los estudiantes como parte de las actividades asincrónicas debían ver dos videos tomando nota de los conceptos más importantes y además de todas aquellas preguntas que tuviesen para su posterior tratamiento en la clase. El primer video es una presentación de la bioinformática y el segundo video es una presentación de las bases de datos PDB y PubChem. En el que además de presentar el entorno virtual, se presentan sus herramientas básicas y cómo realizar las descargas de proteínas en compuestos. Por lo que las actividades asincrónicas de la primera sesión responden al primer indicador desde la visión de Fandos (2003): Reconocer el entorno del software y sus herramientas básicas. Además, se verifica el reconocimiento del entorno y de sus herramientas por medio del reto 1.

## Sesión 2.

En la segunda sesión se desarrollaron las actividades descritas en la tabla 6:

**Tabla 6**

*Actividades previstas para la segunda sesión según el programa guía de actividades diseñado*

Sesión	Tiempo	Actividad	Objetivo	Modalidad	Herramienta utilizada	Instrumento de evaluación	Modalidad de la actividad teniendo en cuenta el modelo de investigación ABI	Anexos
2	30 m	<b>Actividad de socialización y discusión de los videos:</b> Se inicia la sesión con las siguientes preguntas orientadoras: -¿Cuál es el objetivo de la bioinformática? -¿Con qué proteína y compuesto vamos a trabajar? -¿Por qué hemos hecho todo esto? -¿Por qué es necesario mantener a las moléculas con la menor energía?	El objetivo de esta actividad es que se resuevan primordialmente las dudas en torno a los videos y a las preguntas que surgieron en el proceso de verlos.	Sincrónica/ Grupo	1. Tablero/Marcador 2. Presentación "Bioinformática"	No aplica	Investigación orientada	<b>Anexo 6.</b> Diapositivas bioinformática. <b>Anexo 7.</b> Criterios de selección de proteínas.
	60 m	<b>Reto 1 :</b> En este reto los estudiantes debían seleccionar entre 4 proteínas de BCR-ABL (3OY3, 3IK3, 1K1F,4GW) la más apropiada para hacer el docking molecular con el alfa tocoferol, la selección será con base en los criterios expuestos en el video 2. ¿Cómo seleccionar la proteína? Además deben realizar una justificación de su elección con base en los 5 criterios presentados en el video.	El objetivo de la actividad es enfrentar a los docentes en formación al reto de utilizar los conocimientos aprendidos en el video seleccionando la proteína más adecuada para el docking molecular.	Sincrónica/ Grupo	<b>Base de datos:</b> <b>RCSB PDB</b> <a href="https://www.rcsb.org/">https://www.rcsb.org/</a>	Rúbrica de evaluación para la selección de proteínas según su grado de calidad. Fuente: Creación propia.	Investigación basada en la práctica	<b>Anexo 8.</b> Guía de ayuda para la selección de proteínas en PDB. <b>Anexo 9.</b> Guía para el Reto 1.
	30 m	<b>Socialización de la corrección del reto 1.</b> En esta actividad se realiza una corrección en colectivo de las respuestas dadas por los estudiantes y además se resuelven dudas en cuanto a los criterios de selección.	El objetivo de la actividad es identificar las selecciones de los estudiantes y realizar las correcciones pertinentes.	Sincrónica/ Grupo	Guía de corrección	No aplica	No aplica	<b>Anexo 10.</b> Guía de corrección del reto 1.

Fuente: Elaboración propia.

En esta sesión se realizó una resolución de dudas en cuanto a los videos asignados en las actividades asincrónicas por medio de unas preguntas orientadoras. Posteriormente, se propuso el reto 1 a los docentes en formación y finalmente se realizó una socialización con los estudiantes. Posterior a esto, se asignaron dos actividades asincrónicas para la próxima sesión. Las actividades asincrónicas en este caso apuntan al criterio de Fandos (2003): Dominar las herramientas básicas comprendiendo sus funciones dentro del entorno del software. Este dominio será evaluado en el reto 2.

Por lo que se asignaron actividades asincrónicas; la primera actividad, revisar el documento “Guía refinamiento de proteínas y ligandos” y realizar el reto 2; la segunda actividad es revisar el video de optimización de las proteínas en Chimera UCSF. -Véase la tabla 7-

**Tabla 7**

*Actividades asincrónicas desarrolladas posterior a la segunda sesión*

Actividad	Tiempo	Actividad	Objetivo	Modalidad	Herramienta utilizada	Instrumento de evaluación	Modalidad de la actividad teniendo en cuenta el modelo de investigación ABI	Anexos
Actividad asincrónica:	40 m	<b>Reto 2:</b> En este reto, los docentes en formación utilizando la guía de refinamiento de ligandos y proteínas. En primera instancia, aprendiendo a descargar las proteínas y los ligandos. Posteriormente, optimizando los ligandos con el programa Avogadro. Además de hacer una propuesta inicial sobre el ligando más óptimo para tratar la LMC con base en la consulta de los ligandos propuestos.	El objetivo es desarrollar en los estudiantes la capacidad de dominar herramientas básicas tanto de PDB como de Pubchem además de utilizar el software Avogadro.	Asincrónica /grupal	1. RCSB PDB <a href="https://www.rcsb.org/">https://www.rcsb.org/</a> 2. PubChem: <a href="https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/">https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/</a> 3. Avogadro 4. Guía de refinamiento de ligandos y proteínas.	Atlas ti para el análisis de respuestas abiertas.	Investigación orientada	<b>Anexo 11:</b> Guía de refinamiento de ligandos y proteínas. <b>Anexo 12:</b> Guía del reto 2.
Actividad asincrónica:	20 m	1. Observar el video: ¿Cómo limpiar una proteína en UCSF Chimera para realizar docking molecular? 2. Traer preguntas y tomar notas.	El objetivo es presentar el entorno de Chimera UCSF y sus herramientas básicas para que optimicen la proteína que descargaron en el reto 2.	Asincrónica /grupal	<a href="https://youtu.be/wxntlv5ovxU?si=zKGbWBUk_8t_kjDE">https://youtu.be/wxntlv5ovxU?si=zKGbWBUk_8t_kjDE</a>	No aplica	Investigación orientada	<b>Anexo 13:</b> Código QR y link para acceder al video "¿Cómo limpiar una proteína en UCSF Chimera para realizar docking molecular?"

Fuente: Elaboración propia

**Sesión 3**

En la tercera sesión se desarrollaron las actividades descritas en la tabla 8:

**Tabla 8**

*Actividades previstas para la tercera sesión según el programa guía de actividades diseñado*

Tiempo	Actividad	Objetivo	Modalidad	Herramienta utilizada	Instrumento de evaluación	Modalidad de la actividad teniendo en cuenta el modelo de investigación ABI	Anexos
20 m	<b>Resolución de dudas sobre el reto 2:</b> Se realizaron una verificación de que los estudiantes descargaran las proteínas y ligandos en los formatos adecuados (PDB y .mol2). Resolución de preguntas sobre el video.	Identificar las dudas en torno al reto dos y las propuestas de los docentes frente al ligando más efectivo para el tratamiento de la LMC.	Sincrónica / Grupal	No aplica	No aplica	No aplica	No aplica
40 m	<b>Presentación Docking Molecular:</b> Se realiza una presentación de contextualización de qué es el docking molecular, su objeto de estudio, los posibles usos que se le dan, los principios que usan los softwares para realizarlo, una explicación de cómo se asignan los resultados y el cómo leer los resultados arrojados por el software.	Contextualizar a los docentes en formación sobre el docking para que tuviesen una mejor comprensión de la actividad que realizarían en el reto 3.	Sincrónica/ Grupal	Guía de docking molecular.	No aplica	Investigación orientada	<b>Anexo 14:</b> Guía de docking molecular.
90 m	<b>Solución del reto 3:</b> En este reto los docentes en formación deben utilizar lo aprendido en el video de optimización de proteínas y ligandos para posteriormente realizar el docking molecular. Finalmente, deben comparar su propuesta en el reto 2 con los resultados del docking molecular y verificar si coinciden.	1. Exponer la relación entre la Leucemia Mielóide crónica, la extracción del alfatocoferol de la semilla de la mora y el posible tratamiento de la enfermedad por medio de este extracto. 2. Presentar los objetivos del taller y su relación con la clase de bioquímica.	Sincrónica/ Grupal	Software: Chimera UCSF Software: PyRx Guía de reto 3.	No aplica	Investigación orientada	<b>Anexo 15:</b> Guía de reto 3.
30 m	<b>Socialización de resultados:</b> En esta actividad se discutió sobre el desarrollo de la actividad y los resultados obtenidos.	El objetivo era comparar los resultados entre grupos e identificar las discrepancias entre grupos.	Sincrónica/ Grupal	Tablero y marcadores	No aplica	No aplica	No aplica

Fuente: Elaboración propia

En esta sesión, el criterio que se tuvo en cuenta desde la perspectiva de Fandos (2003) fue comprender cómo utilizar las herramientas para desarrollar tareas simples o resolver problemas, el reto 3 daría cuenta de este criterio. En ese sentido, con base en la visualización del video, la presentación sobre el docking y la guía de docking molecular los estudiantes realicen el ejercicio de acoplamiento molecular con las proteínas y ligandos que refinaron. Finalmente, los docentes en formación debían comprobar su propuesta del reto dos con los resultados del docking molecular para su posterior comparación entre grupos.

#### Sesión 4.

En la cuarta sesión se desarrollaron las actividades descritas en la tabla 9:

**Tabla 9**

*Actividades previstas para la cuarta sesión según el programa guía de actividades diseñado*

Sesión	Tiempo	Actividad	Objetivo	Modalidad	Herramienta utilizada	Instrumento de evaluación	Modalidad de la actividad teniendo en cuenta el modelo de investigación ABI	Anexos
	40 m	<b>Prueba de salida:</b> Los docentes en formación presentan la prueba de salida	El objetivo de esta actividad es comparar los conocimientos de los docentes con la prueba de entrada en cuanto a bioinformática, docking y también las competencias que adquirieron en el desarrollo de los retos.	Sincrónica/ Individual	Herramienta de recolección: Formulario de Microsoft teams.	1. Atlas ti para el análisis de respuestas abiertas. 2. Prueba Likert para evaluar el desarrollo de competencias.	Investigación orientada	<b>Anexo 16.</b> Preguntas de la prueba de salida.
4	60 m	<b>Reto 4 :</b> En este reto los docentes en formación deben proponer una actividad que inmiscuya como mínimo dos herramientas bioinformáticas y que sirva para enseñar una temática o un concepto de bioquímica. La actividad debe contemplar:  - Definir cuál concepto van a enseñar y una posible población para la aplicación. -Conocimientos previos que deben tener para el desarrollo de su actividad. -Proponer un objetivo (s) de aprendizaje. -Señalar cuáles son las herramientas bioinformáticas que van a utilizar de las utilizadas en el taller. -Describir de manera somera la metodología de trabajo con dichas herramientas.	El objetivo de la actividad es enfrentar a los docentes en formación al reto de reflexionar otros posibles usos de la herramientas bioinformáticas presentadas para que los integren a sus prácticas docentes	Sincrónica/ Grupo	Guía del reto 4	Rúbrica de evaluación	Investigación basada en la práctica	<b>Anexo 17.</b> Guía del reto 4
	10 m	Agradecimiento y cierre de las actividades	No aplica	No aplica	No aplica	No aplica	No aplica	No aplica

*Fuente: Elaboración propia*

En esta sesión se realizó la prueba de salida y además se realizó la última actividad que corresponde a la actividad de reflexión pedagógico-didáctica promovida por el reto 4, que está en sintonía con la visión de que el docente es “Capaz de apreciar la base del aprendizaje on-line y el potencial de la web y de Internet para el aprendizaje” (Fandos, 2003, p.203). Lo que se traduciría en un posible impacto a futuro en el que los docentes podrían utilizar estas herramientas en su ejercicio docente, más puntualmente en la enseñanza de la bioquímica.

#### **Fase de análisis y evaluación de la implementación**

En esta fase, se realiza una triangulación de los datos obtenidos en las actividades, con el marco teórico y teniendo en cuenta resultados estadísticos que permitan determinar la confiabilidad de las conclusiones arrojadas en la aplicación del proyecto teniendo como base el análisis cualitativo determinado en el software Atlas ti y de carácter cuantitativo gracias a SSPS

## Resultados y Análisis

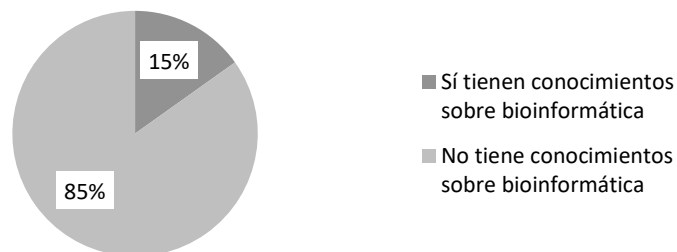
Considerando los referentes teóricos y la aplicación del programa guía de actividades, en este apartado se presentan los resultados y el análisis que suscita cada una de ellas. El análisis se sienta en los resultados arrojados tanto cualitativa como cuantitativamente y además se realiza una triangulación con autores para poder tener una perspectiva mucho más amplia.

### De la prueba de entrada

En la prueba de entrada el objetivo principal era determinar el nivel de conocimientos de los docentes en formación. Los temas que se abordaron fueron conocimiento de los docentes en formación; sobre la bioinformática; sobre los softwares que habían utilizado en sus espacios académicos y si entre estos habían utilizado herramientas bioinformáticas; sobre el docking molecular. Respecto a la primera pregunta del anexo 1, sobre si los docentes en formación tenían conocimientos sobre bioinformática, ya sea objeto de estudio, posibles aplicaciones o herramientas. Tal y como se observa en la figura 5, sólo el 15,5% (que corresponde a 5 docentes en formación) afirman tener conocimientos entorno a la bioinformática -véase la figura 5-. Frente a este resultado, se solicita a los docentes que contestan de manera afirmativa que describan los conocimientos que tiene en torno a la temática.

### Figura 5

*Estudiantes que tienen Conocimiento sobre Bioinformática*



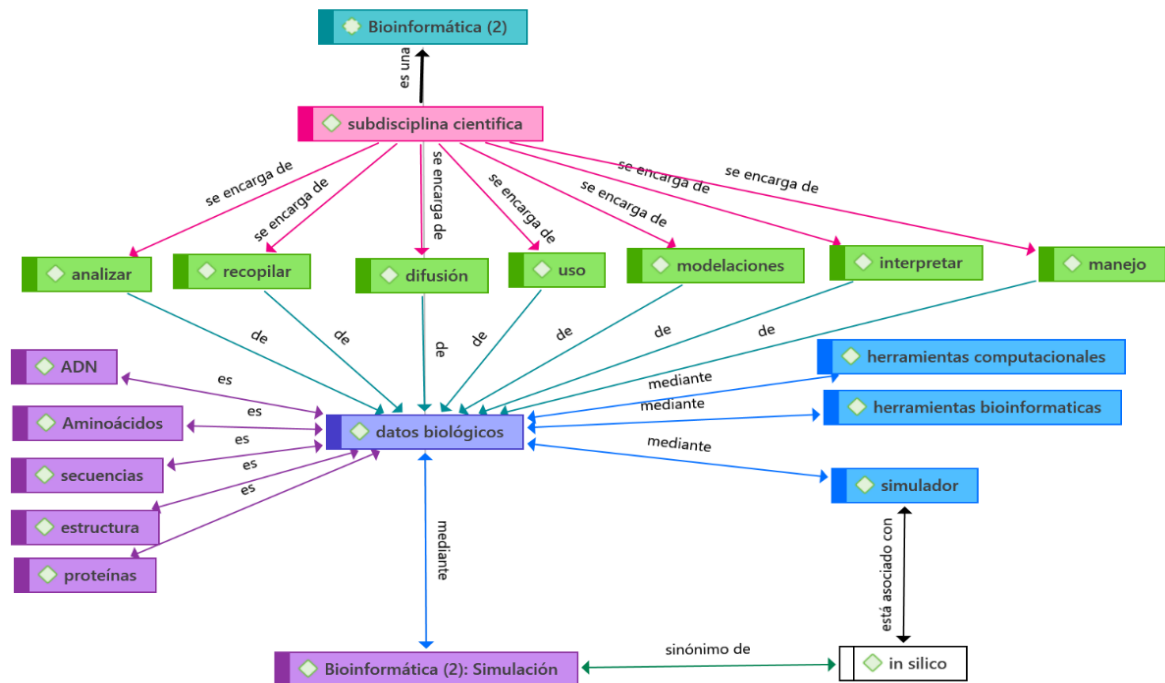
Fuente: Elaboración propia

Para el análisis de las 5 respuestas abiertas de los docentes se realiza en primera instancia una red estructural de la definición de bioinformática en el programa Atlas ti -véase la figura6- y se compara con las redes generadas a partir de las respuestas de los estudiantes para determinar el nivel de relación de las respuestas con la definición postulada por la National Human Genome Research Institute (2022).



**Figura 6**

*Red estructural construida entorno al concepto de bioinformática propuesto por la National Human Genome Research Institute (2022).*



Fuente: Adaptación de la autora de la definición de bioinformática para el análisis cualitativo construida en el programa Atlas ti.

Las redes estructurales planteadas en los resultados de este trabajo se postulan desde la perspectiva de Varguillas (2006) quien plantea que las redes estructurales son una representación gráfica de las diversas posibilidades estructuras o relaciones entre categorías o códigos con el objetivo de crear estructuras teóricas. Para el caso de la red estructural de la definición de bioinformática, se utilizaron 20 códigos que se relacionaron para crear la categoría bioinformática. Para seguidamente, realizar el análisis de las 5 preguntas abiertas de los estudiantes.

Las respuestas afirmativas de estos 5 estudiantes se pueden englobar en dos grupos. En el primer grupo conformado por 3 estudiantes (E7, E33 y E22), se relaciona directamente a la bioinformática con sus herramientas y se plantea fundamentalmente ciertas utilidades que los estudiantes han observado en sus clases como la modelación de estructuras por medio de simulación. Como es el caso de la E7 y E33 que mencionan que: “Se utiliza para realizar modelaciones, estructuras, pruebas *in vitro*, *in vivo*, *in silico*” y “Se trata de un modelado de una molécula o estructura por

medio de un simulador para interpretar sus características y formas de reaccionar”. En este aspecto, los dos participantes mencionan la modelación, las estructuras y que se realiza por medio de simulación (in silico). Sin embargo, la E7 menciona que también se realiza de manera in vitro e in vivo, que se aleja del objetivo de la bioinformática según la definición de la National Human Genome Research Institute (2022) pues todo el trabajo se realiza de manera computacional o simulación. En lo que concierne al E22: “Herramientas bioinformáticas como Psipred y desde la química computacional Avogadro y Gabedit”.

En tal sentido, partiendo de la red estructural del concepto de bioinformática se encuentran las coincidencias que se observan en la red que se expone en la figura 7 que corresponden a las nociones de bioinformática del E7.

### Figura 7

Red estructural construida a partir de los conceptos encontrados en la respuesta del E7



Fuente: Obtenido a partir de Atlas ti

Se puede ver que si bien es cierto que el E7 tiene nociones sobre la bioinformática las relaciones entre conceptos no son tan claras. Que es el mismo caso del E22 -véase figura 8- quien menciona solamente herramientas computacionales que ha utilizado, pero no presenta ninguna de las relaciones entre conceptos. En el segundo grupo, se encuentran la E8 y la E10 quienes presentan relaciones un poco más complejas y aproximadas a la definición estándar de bioinformática. En ese sentido, el E8 define a la bioinformática como: “En clases anteriores utilizamos una herramienta bioinformática la cual brinda la información que se conoce hasta el momento de proteínas descubiertas y sus datos correspondientes.” Por tanto, se presenta la red estructural en la figura 9 que permite dilucidar relaciones entre las herramientas bioinformáticas, los datos biológicos de las proteínas y su uso.

### Figura 8

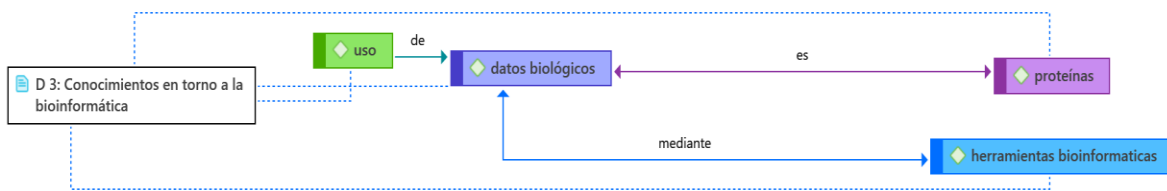
Red estructural construida a partir de los conceptos encontrados en la respuesta del E22



Fuente: Obtenido a partir de Atlas ti

**Figura 9**

*Red estructural construida a partir de los conceptos encontrados en la respuesta del E8*

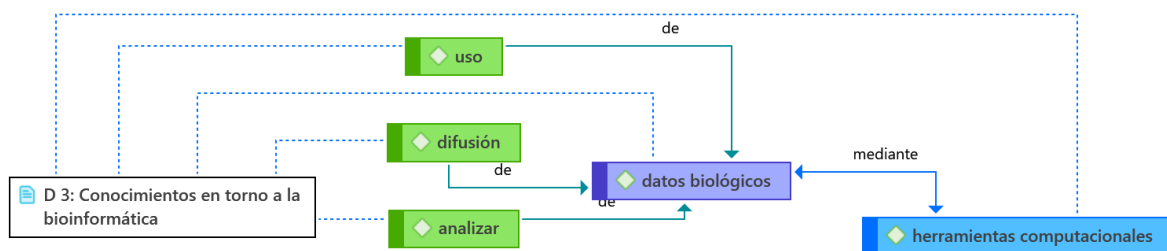


Fuente: Obtenido a partir de Atlas ti

Por su parte, el E10 menciona que la bioinformática es el "Análisis y difusión de datos biológicos, aplicación de herramientas computacionales" -véase la figura 10-. Ambas estudiantes presentan unos postulados bastante aproximados tanto al objetivo de la bioinformática de análisis y difusión de datos biológicos como a una de sus posibles aplicaciones, como se identificó desde la visión de (Ballón Paucara y Grados Torrez, 2019) que postula la realización de simulaciones para reconocer posibles formas de tratamiento y utilización de moléculas, también conocido como docking molecular. Por lo que, los estudiantes que realizan la afirmación de reconocer aspectos como objeto de estudio, posibles aplicaciones o herramientas de la bioinformática, poseen unas ideas previas bastante aproximadas en los dos grupos.

**Figura 10**

*Red estructural construida a partir de los conceptos encontrados en la respuesta del E10*



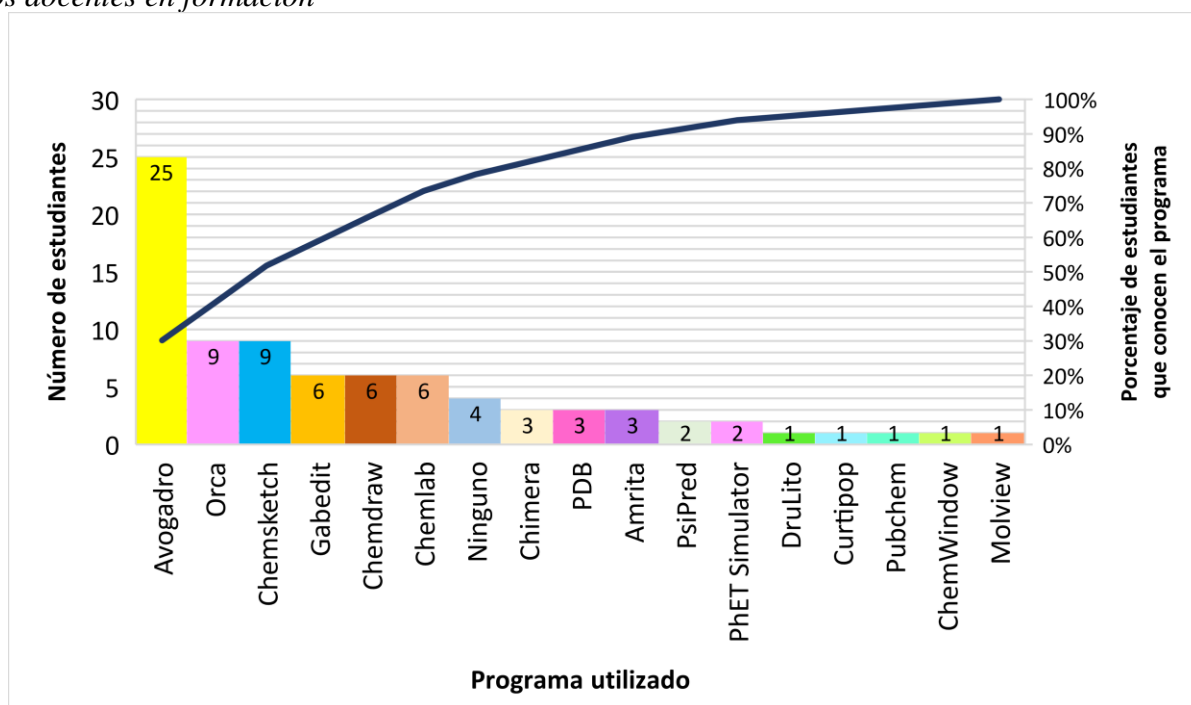
Fuente: Obtenido a partir de Atlas ti

Desde esa perspectiva, si bien es cierto que la mayoría de los docentes en formación no poseen conocimientos entorno a la bioinformática, los que tienen nociones hacen relaciones tanto a herramientas como a los usos que les han brindado en sus espacios académicos. Por lo anterior, se consideró pertinente preguntarles a los docentes cuáles eran las herramientas que más habían utilizado a lo largo de su paso por el departamento de química.

La pregunta tres de la prueba de entrada arroja información sobre el tipo de programas que han utilizado los docentes en formación a lo largo de su carrera y permitió identificar si los softwares que serían abordados en las sesiones ya eran conocidos por ellos. Por lo que se encontró que el programa más utilizado reportado fue Avogadro utilizado por un 83,3% de la población, seguido de Chems sketch y Orca utilizados por un 30% de los docentes, seguido de Gabedit, Chemlab y Chemdraw utilizado por un 20%. Por lo que los programas más utilizados por los docentes en formación son: Avogadro, Chems sketch, Orca, Gabedit, Chemlab y Chemdraw -como se puede observar en figura 11-.

**Figura 11**

*Diagrama de Pareto realizado a partir de los programas utilizados a lo largo de la carrera por los docentes en formación*



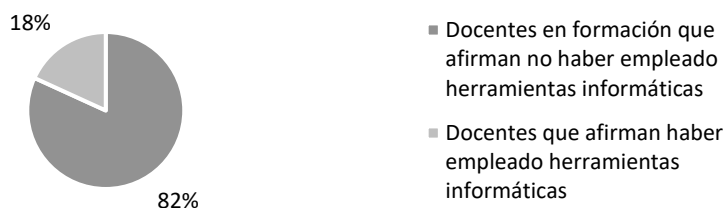
Fuente: Elaboración propia

De los 5 programas más mencionados se realizó una breve consulta acerca de su principal utilidad. Esta consulta se realizó con el objetivo de identificar si se habían usado durante la carrera programas con funcionalidades similares a las vistas en el taller realizado. En este caso, los programas presentados en el taller son: Avogadro, PyRx y Chimera. Además de bases de datos como PDB y PubChem. De los cuales ningún docente había utilizado PyRx, tres de ellos habían utilizado Chimera, tres de ellos habían utilizado la base de datos PDB y uno de ellos PubChem.

El programa más utilizado por los estudiantes fue Avogadro, cuya principal funcionalidad es la edición y visualización de moléculas para diversos usos entre ellos la bioinformática (Hanwell et al., 2012). Lo que resultó realmente útil para el desarrollo del taller, puesto que los estudiantes estaban familiarizados con el entorno de Avogadro y facilitó la estabilización energética de las moléculas de trabajo. En lo que concierne a si alguna de estas herramientas fue usada para el desarrollo de análisis tópicos relacionados con genética, fármacos o enfermedades en los espacios académicos de los docentes, se encontró que el 82% (equivalente a 27 docentes) no las había empleado en sus espacios académicos. -cómo se puede observar en la figura 12-.

## Figura 12

*Resultados de la pregunta de si utilizaron los programas para el desarrollo de tópicos relacionados con genética, fármacos o enfermedades*



Fuente: Elaboración propia

El otro 18% (que corresponde a 6 docentes en formación) lo utilizó en las siguientes actividades:

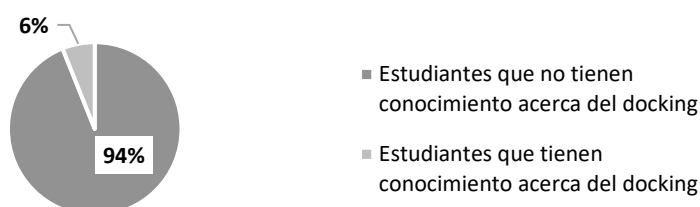
- *En Avogadro*: Para la creación de estructuras moleculares 3d y diseños de moléculas. (E10 y E12)
- *En PDB*: Visualización de estructura de proteínas. (E23 y E26)
- *En PubChem*: Búsqueda de información de algunos fármacos en cuanto a su estructura química, modo de fabricación, patentes, nombres comerciales, etc. (E27)
- *En ORCA*: Para el análisis de componentes de frutas y sus acciones al inhibir proteínas causantes de la enfermedad del Parkinson. (E30)

Curiosamente, de los docentes que mencionaron que sí tenían nociones sobre la bioinformática (E7, E8, E10, E22 y E33) en la pregunta uno, exceptuando al E10, afirmaron no haber utilizado dichas herramientas en los tópicos mencionados, lo que amplió el espectro de docentes que manejaron herramientas con un enfoque bioinformático. Por ejemplo, el E23 y el E26 quienes manipularon PDB, de igual forma el E27 quién realizó búsquedas en PubChem (una de las bases de datos utilizadas en el proyecto) y el E30 quien realizó un ejercicio completo en torno a las proteínas causantes de la enfermedad del Parkinson en Orca. Por lo que se puede postular que si bien es cierto estos 9 docentes en formación han manejado programas podrían desconocer sus potencialidades en la bioinformática.

Lo que representa una oportunidad para este trabajo. Anexo a esto, como se puede observar en la figura 13, el 94% de los estudiantes afirma no tener conocimiento sobre lo que es el docking molecular y el 6% afirma que sí (que corresponde a 2 docentes en formación).

### Figura 13

*Resultados de la pregunta de si tienen conocimientos acerca del docking molecular*



Fuente: Elaboración propia

Por lo que este taller tiene como oportunidad de impacto presentar las potencialidades de las herramientas y programas que los docentes conocen, además de ampliar sus perspectivas por medio de la reflexión pedagógica en cuanto al uso e incorporación de éstas en sus prácticas docentes. Esto último fundamentado en la perspectiva de Cuetos Revuelta et al., quien considera que la utilización de las TIC en los espacios educativos podría mejorar el proceso de enseñanza aprendizaje, ya que al tener como ventaja que el aprendizaje resulta más atractivo los estudiantes se pueden ver más implicados y por tanto se logren conseguir aprendizajes significativos (2020). Lo que generaría un impacto positivo en los ejercicios de los docentes en formación implicados en este taller que corresponde al tercer objetivo de este trabajo de grado.

### De la infografía

Como parte del ejercicio de contextualización se propone a los estudiantes que realicen una infografía en la que plantearán las relaciones encontradas en los fragmentos leídos del artículo encontrados en la guía Leucemia Mieloide Crónica: Origen genético de la enfermedad. Para la evaluación de esta actividad se propone una rúbrica para la evaluación de infografías tomada y modificada de Méndez (2015) en la que se proponen cuatro criterios de evaluación; Si el contenido y las relaciones presentadas en la infografía se encuentran relacionados con el artículo presentado; Si los gráficos son pertinentes y las referencias se encuentran presentes; Si los docentes añaden información adicional y si la información presenta una estructura adaptada a los requerimientos de una infografía y finalmente su diseño.

**Tabla 10***Rúbrica de evaluación de infografía*

Criterios de evaluación	Niveles de desempeño			
	Excelente 5	Bueno 4	Aceptable 3	Mal 2
<b>Contenido y relaciones presentadas en el artículo</b>	La infografía da cuenta de toda la información presentada en el artículo y de la relación entre la LMC, sus causas genéticas y el alfatocofeol como posible tratamiento.	La infografía cuenta con la información de las causas genéticas de la LMC, sin embargo deja de lado los aspectos planteados sobre sus posibles tratamientos con extractos como el alfatocofeol.	La infografía no presenta las causas de la enfermedad ni su posible tratamiento con el alfa tocoferol. Sólo menciona generalidades de la enfermedad.	La infografía no presenta el contenido ni las relaciones presentadas en el artículo.
<b>Coherencia y pertinencia</b>	Los gráficos están relacionados con el tema y son fáciles de entender. Las fuentes del artículo están citadas.	Los gráficos están relacionados con el tema y en su mayoría son fáciles de entender. La mayoría de las fuentes están citadas.	Los gráficos están relacionados con el tema, sin embargo no están citadas las fuentes.	Los gráficos no están relacionados y no tiene citadas las fuentes.
<b>Organización de la información y consulta de datos adicionales</b>	El tema se expone de manera enfocada, destaca las ideas principales y además añade datos extra que referencia de manera adecuada.	El tema se expone de manera enfocada, se identifican algunas de las ideas principales, sin embargo no añade datos extras.	El tema se expone de manera desordenada y no se añaden datos extra.	El tema no presenta un orden y no se añaden datos extra.
<b>Diseño y composición de la infografía</b>	Los diagramas e ilustraciones son ordenados y precisos, se combinan perfectamente con el texto para mejorar el entendimiento del tema.	Los diagramas e ilustraciones no son ordenados ni precisos y rara vez se combinan con el texto para mejorar el entendimiento del tema.	Los diagramas e ilustraciones no son ordenados ni precisos y no se combinan con el texto para mejorar el entendimiento del tema.	Los diagramas e ilustraciones no son ordenados ni precisos y no se presenta la estructura de una infografía.
<b>Total</b>	<b>20</b> Excelente calidad	<b>19-15</b> Buena calidad	<b>14-10</b> Calidad intermedia	<b>5-9</b> Baja calidad

Fuente: Adaptado y modificado de Méndez (2015)

Por medio del instrumento presentado en la tabla 10 se realizó la evaluación de las infografías presentadas por los siete grupos conformados a lo largo del taller. En ese sentido, los resultados generales arrojan como se presenta en la tabla 11 que el 57,1% (que corresponde a 4 grupos) tienen una buena infografía y el 28,6% (que corresponde a 2 grupos) tienen una excelente calidad. Sólo uno de los grupos que corresponde al 14,3% tiene una infografía de calidad media.

**Tabla 11**

*Resultados arrojados por SPSS para el análisis de los resultados arrojados*

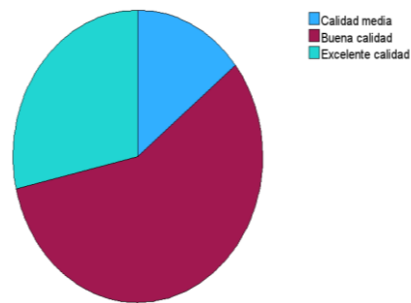
		Frecuencia	Porcentaje	Porcentaje válido	Porcentaje acumulado
Válido	Calidad media	1	14,3	14,3	14,3
	Buena calidad	4	57,1	57,1	71,4
	Excelente calidad	2	28,6	28,6	100,0
	Total	7	100,0	100,0	

Fuente: Obtenido a partir de SPSS

En términos generales, la actividad de socialización permitió cumplir con los dos objetivos planteados para esta actividad. El primero, que era identificar las causas genéticas que desencadenan a la LMC fue cumplido por la totalidad de los grupos, sin embargo, frente al segundo que era realizar la relación entre la LMC, la extracción de alfa tocoferol y el uso de este extracto como posible tratamiento de la LMC solamente 4 de los 7 grupos (el 57,14%) dieron cuenta de estas relaciones. Además de esto, resulta importante resaltar que el 85,7% realizaron infografías que se clasifican entre el rango de excelente y buena calidad -como se observa en la figura 14-.

**Figura 14**

*Resultados de la calidad de las infografías presentadas por los grupos*



Fuente: Obtenido a partir de SPSS

En ese sentido, la selección de la rúbrica como instrumento para relacionar la información favoreció el cumplimiento de los dos objetivos de esta actividad. Lo que se encuentra en consonancia con la visión de Acuña (2018) quien contempla que desde la neurociencia las infografías activan los dos hemisferios favoreciendo el razonamiento lógico y asociándolo a la visualización e interpretación de imágenes. Lo que favorece la comprensión del conocimiento y sus relaciones como se puede evidenciar con los resultados mayoritariamente positivos de esta actividad. De manera ejemplificadora se presentan las infografías del G5 que corresponde al nivel “Excelente calidad” -véase la figura 15- y la infografía del G7 que corresponde a “calidad media” -véase la figura 16-



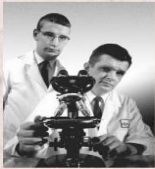
# Figura 15

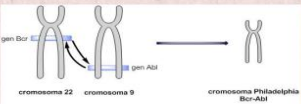
Infografía presentada por el G5 evaluada como de excelente calidad según la evaluación

## Leucemia Mielóide Crónica (LMC)

### Descubrimiento (1959)

Peter Nowell y David Hungerford identificaron la primera alteración cromosómica asociada a una enfermedad maligna, la LMC. Se creía que era consecuencia de la pérdida de material genético en el cromosoma.





**CLAVES:**  
BCR: Breakpoint cluster region  
ABL: gen Abelson (adquirido por el cromosoma a partir del virus Abelson)

### Janet D. Rowley

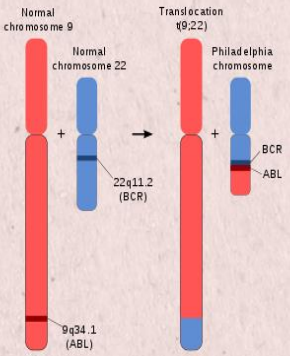
Esta enfermedad se genera debido a la translocación recíproca entre los brazos largos de los cromosomas 9 y 22.

### Genes implicados

Gen BCR produce dos oncogenes diferentes:

- 1. BCR-ABL p190 - LAE (leucemia aguda linfoblástica)
- 1. BCR-ABL p210 - LMC (leucemia mielóide crónica)

**Actividad Tirosinquinasa constitutiva.**  
La actividad Tirosinquinasa y la fusiones génicas, de BCR con ABL, codifica una oncoproteína quimérica con mecanismo de transformación celular.




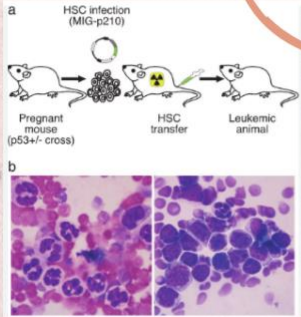
Tomado de: <https://images.app.goo.gl/aSXdC4MF6SszPJQjfi>

### Investigación en ratones

La infección de células de médula ósea de ratón con retrovirus que codifican la fusión BCR-ABL causa el síndrome mieloproliferativo (BCR-ABL p210) - Fenotipo maligno.

Similar al LMC en humanos - células cancerosas.





Tomado de: <https://images.app.goo.gl/dwD7evZArscakL4r57>

### Tratamientos para LMC

- Quimioterapia, radioterapia y trasplante de células madre -> Disminución del 15 al 20%, ya que los pacientes presentan resistencia o intolerancia al tratamiento.
- Reducción de estrés oxidativo - Inducir apoptosis a las células cancerosas -> Cambio en el mecanismo redox.
- TPGS (D- $\alpha$ -tocopherol polietilenglicol 1000 succinato) -> nanoencapsulamiento de principios activos.

### Estrés oxidativo (EO)

- Desbalance entre la alta producción de especies reactivas de oxígeno (EROs) provenientes del metabolismo celular y los mecanismos moleculares antioxidantes diseñados para degradar los EROs.

Tratamiento para pacientes que presentan resistencia o intolerancia a los inhibidores de tirosina quinasa (ITQ)

Fuente: G5 del taller.

**Figura 16**

*Infografía presentada por el G7 evaluada como de calidad media según la evaluación*

# ¿QUÉ ES LA LEUCEMIA MIELOIDE CRÓNICA?

(Enfermedad genética)

**ORIGEN**

Peter Nowel y David Hungerford

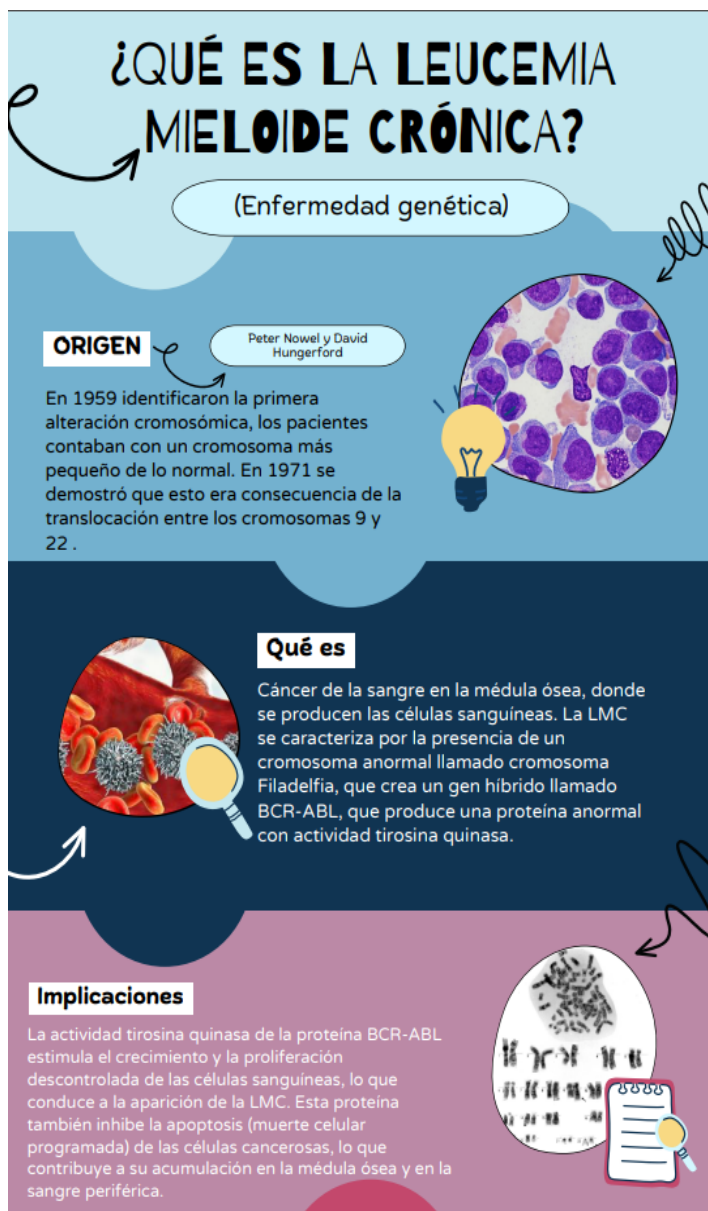
En 1959 identificaron la primera alteración cromosómica, los pacientes contaban con un cromosoma más pequeño de lo normal. En 1971 se demostró que esto era consecuencia de la translocación entre los cromosomas 9 y 22.

**Qué es**

Cáncer de la sangre en la médula ósea, donde se producen las células sanguíneas. La LMC se caracteriza por la presencia de un cromosoma anormal llamado cromosoma Filadelfia, que crea un gen híbrido llamado BCR-ABL, que produce una proteína anormal con actividad tirosina quinasa.

**Implicaciones**

La actividad tirosina quinasa de la proteína BCR-ABL estimula el crecimiento y la proliferación descontrolada de las células sanguíneas, lo que conduce a la aparición de la LMC. Esta proteína también inhibe la apoptosis (muerte celular programada) de las células cancerosas, lo que contribuye a su acumulación en la médula ósea y en la sangre periférica.



Fuente: G7 del taller.

**Diagnóstico**

El diagnóstico de la LMC se basa en la detección del cromosoma Filadelfia y/o del gen BCR-ABL en las células sanguíneas mediante técnicas de citogenética y biología molecular, respectivamente.

**TRATAMIENTO**

La regulación del estrés oxidativo (EO) surge como un mecanismo interesante para el tratamiento de la LMC. Este fenómeno permitiría que, mediante el uso de moléculas prooxidantes capaces de aumentar las EROs, se estimulen las vías de señalización encaminadas a la inducción de apoptosis, conduciendo a la muerte de las células cancerosas.

OXIDATIVE STRESS



## Del Reto 1

El objetivo del primer reto era enfrentar a los docentes en formación a una actividad en la que fuese primordial la utilización de los conocimientos aprendidos en los videos en cuanto a reconocimiento del entorno de PDB y sus herramientas básicas para la identificación de calidad de las proteínas. Puesto que, la proteína seleccionada se utilizaría como blanco en el docking molecular. En este reto, los estudiantes debían seleccionar entre 4 proteínas propuestas de BCR-ABL (3OY3, 3IK3, 1K1F,4GW), que fue el blanco propuesto para el tratamiento de la LMC, y debían explicar cuál era la más apropiada para hacer el docking molecular según los criterios expuestos en el video 2.

La proteína de mayor calidad se postuló según el estudio realizado por Gomari et al., (2021), que trabajo en una experiencia de prueba de medicamentos para el tratamiento de la LMC. La proteína es 3OY3 y posteriormente se buscaron proteínas que fuesen similares, pero de menor calidad como la 3IK3, la 4AGW y la 1K1F. Presentadas de mayor a menor calidad. Consecuentemente, la proteína que dificultaría más el proceso sería la 3IK3 puesto que está es un homólogo de menor calidad de la 3OY3 y las otras dos tienen una calidad considerablemente menor por lo que no deberían ser seleccionadas según lo esperado.

El reto 1 responde a la perspectiva de Fandos (2003) que establece como criterio el “reconocer el entorno del software y sus herramientas básicas”. Por lo que, se postuló que, si los estudiantes conseguían cumplir favorablemente el reto, se podría asimilar que son capaces entonces de reconocer el entorno de la base de datos PDB y que reconocen sus herramientas básicas para poder utilizar ese conocimiento y responder una pregunta como: ¿Cuál de las proteínas tiene mejor calidad? Por lo que para la evaluación de este reto se utilizó una rúbrica -véase tabla 12- que contempla los 4 criterios de calidad y la justificación de la elección que los estudiantes debían realizar para seleccionar la proteína de mayor calidad.

En esta rúbrica se postulan 4 posibles alternativas asociadas a calidades diferentes de las proteínas propuestas:

- Excelente calidad: 3OY3
- Buena calidad: 3IK3
- Calidad intermedia: 4AGW
- Baja calidad: 1K1F

**Tabla 12***Rúbrica de evaluación de calidad de proteína*

<b>Criterios de evaluación</b>	<b>Excelente calidad 5</b>	<b>Buena calidad 4</b>	<b>Calidad intermedia 3</b>	<b>Baja calidad 2</b>
<b>Ligando y su calidad</b>	El estudiante elige la proteína que posee un ligando y el ligando tiene excelente calidad. (Se encuentra en la parte azul de la barra indicadora)	El estudiante elige la proteína que posee un ligando y el ligando tiene una calidad media. (Se encuentra en la parte blanca de la barra inidcadora)	El estudiante elige la proteína que posee un ligando y el ligando tiene mala calidad. (Se encuentra en la parte roja de la barra indicadora)	El estudiante elige la proteína que no posee ligando.
<b>Método de cristalización de la proteína</b>	El estudiante selecciona la proteína que fue cristalizada por espectroscopia de RMN	El estudiante selecciona la proteína que fue cristalizada por difracción de rayos X y que tiene una resolución entre 1,6 - 2,0	El estudiante selecciona la proteína que fue cristalizada por difracción de rayos X y que tiene una resolución entre 2,1-2,5	El estudiante selecciona la proteína que fue cristalizada por difracción de rayos X y que tiene una resolución entre 2,6-3,0
<b>Resolución en Å (angstrom)</b>	El estudiante selecciona la proteína con una resolución en angstrom entre 1.0 - 1.5	El estudiante selecciona la proteína con una resolución en angstrom entre 1.6 -2.0	El estudiante selecciona la proteína con una resolución en angstrom entre 2.1-2.5	El estudiante selecciona la proteína con una resolución en angstrom entre 2.6 -3.0
<b>Valor de R-Libre</b>	El estudiante selecciona la proteína con un valor de R-Libre entre 0,19 -0,22	El estudiante selecciona la proteína con un valor de R-Libre entre 0,23 -0,26	El estudiante selecciona la proteína con un valor de R-Libre entre 0,27 - 0,29	El estudiante selecciona la proteína con un valor de R-Libre mayor a 0.29
	20 excelente calidad	19-15 Buena calidad	14-10 Calidad intermedia	5-9 Baja calidad

Fuente: Creado a partir de los criterios suministrados por Andryech (2020).

Esta rúbrica se analizó por medio de confiabilidad de Cronbach que, desde la perspectiva de Oviedo & Campo-Arias es un índice usado para medir la confiabilidad de una escala respecto a su consistencia interna (2005). Este mismo estudio propone que el valor mínimo aceptable para este coeficiente es 0,70; por debajo de ese valor la consistencia interna de la escala utilizada es baja y el valor máximo esperado es 0,90 que refleja una consistencia alta. A la rúbrica se le aplicó este alfa mediante el programa SPSS y se obtuvo un alfa de 0,90, como se puede observar en la tabla 13. Lo que da cuenta de la confiabilidad del instrumento.

**Tabla 13***Estadísticas de fiabilidad de la rúbrica de evaluación de calidad de proteína*

Alfa de Cronbach	Alfa de Cronbach basada en elementos estandarizados	N de elementos
,900	,987	3

Fuente: Realizado con SPSS por la autora

En lo que concierne a los resultados obtenidos en esta actividad se encontró que el 71,4% (que corresponde a 5 grupos) de los grupos seleccionó a la proteína 3OY3 como la proteína de excelente calidad. Lo que se encuentra en consonancia con lo esperado y postulado por el estudio de Gomari et al., (2021). Sin embargo, también se encuentra que uno de los grupos (14,3%) eligió la proteína 3IK3 con la que se esperaba se encontrarán similitudes que fueron aclaradas en la actividad de socialización. Finalmente, uno de los grupos seleccionó la proteína 4AGW (14,3%). Como se observa en la tabla 14.

**Tabla 14***Resultados de rúbrica de evaluación calidad de proteína*


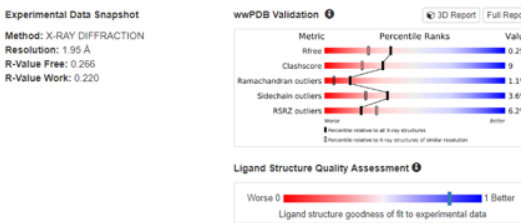
		Frecuencia	Porcentaje	Porcentaje válido	Porcentaje acumulado
Válido	Calidad intermedia	1	14,3	14,3	14,3
	Buena calidad	1	14,3	14,3	28,6
	Excelente calidad	5	71,4	71,4	100,0
	Total	7	100,0	100,0	

Fuente: Obtenido a partir de SPSS

En ese sentido al realizar una perspectiva general del primer reto, se obtiene que el 85,7% de los docentes pudieron seleccionar proteínas que podrían funcionar en el proceso de docking molecular (3OY3 y 3IK3) y que pudieron resolver de manera satisfactoria la pregunta. Dando cuenta a su vez, que reconocen el entorno del PDB y sus herramientas básicas, pues sin ese conocimiento no hubiese sido posible la selección de la proteína correcta o de excelente calidad. Anexo a esto, las justificaciones de los grupos que seleccionaron las proteínas, exceptuando al grupo que seleccionó a la 4AGW, dio cuenta del porqué seleccionó su proteína acorde a los criterios expuestos. Lo que demuestra una apropiación de la terminología y de las herramientas. Un ejemplo de ello es la explicación del G5, -véase figura 16-.

**Figura 16**

*Cuadro explicativo de la selección de proteína del G5*

CRITERIO DE SELECCIÓN	JUSTIFICACIÓN
<p>¿Tienen Ligandos?</p> 	<p>La Proteína con mayor calidad posee un único ligando, este es el <b>XY3</b>: 5-[(5-[[4-[[4-(2-hidroxi)etil] piperazin-1-il]metil]-3-(trifluorometil)fenil]carbamoil]-2-metilfenil) etinil]-1-metil -1H-imidazol-2-carboxamida.</p> <p>Este ligando Posee un buen Experiment Data Fitting, ya que se encuentra en la región azul del gráfico.</p>
<p>¿Cuál es la calidad del Ligando?</p> 	<p>La estructura del ligando <b>XY3</b>, tiene una buena calidad de acuerdo a la evaluación de calidad de la estructura del ligando, es decir, la evaluación se inclina hacia el lado azul, lo que indica que este ligando es el mejor en comparación a los ligandos de las otras tres proteínas.</p>
<p>¿Cuál es el método de Cristalización?</p>	<p>Es método usado fue X-Ray-Difracción</p>
<p>¿Cuál es la resolución en Amperios?</p>	<p>La resolución de la Proteína es de <b>1.95 Å</b>, lo que indica que tiene una buena resolución, ya que se encuentra alejada de 3 Å.</p>
<p>¿Cuál es el valor de R-Libre?</p>	<p>El valor es <b>0.266</b>, lo que demuestra que se encuentra en el rango de 0.2-0.29 que nos demuestra que es fiable.</p> <p>Es importante resaltar que este dato debe ser menor a 3.0.</p>



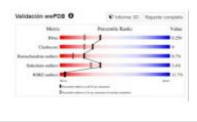

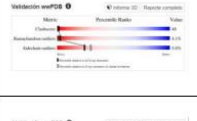
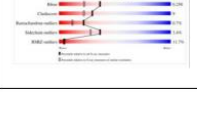
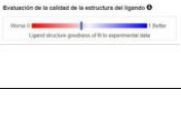
Fuente: Reto 1 del G5.

En la figura 16, se puede observar un cuadro explicativo propuesto por el G5 en el que desglosan cada uno de los criterios de evaluación y en el que describen porqué seleccionaron a la proteína 3OY3. Esta figura da cuenta del nivel de implicación de los estudiantes con la actividad y también su nivel de comprensión pues cada una de las justificaciones descritas está correcta. Otra de las propuestas de los estudiantes de análisis fue la desarrollada por el G4-véase figura 17-



**Figura 17**

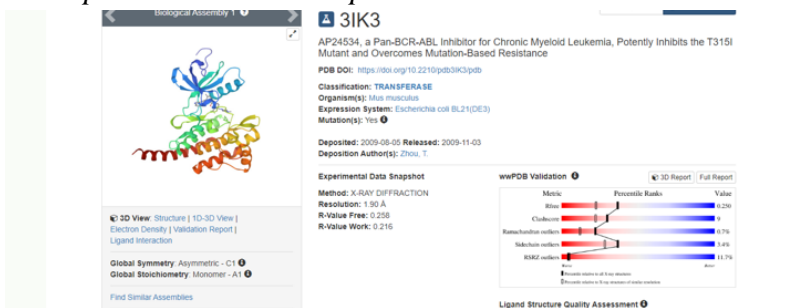
*Cuadro explicativo de la selección de proteína del G4*

Estructura	CRITERIO					
	Información	Ligando	Calidad de ligando	Método de cristalización	Resolución (Å) < 3 Å	Valor R libre < 0,3
3OY3			BUENA	DIFRACCIÓN DE RAYOS X	1,95 Å	0,252
3IK3			MALA		1,90 Å	0,250
1K1F		NO TIENE			2,20 Å	NO TIENE
4AGW			MALA		2,60 Å	0,268

Fuente: Reto 1 del G4

**Figura 18**

*Justificación del G1 para la selección de proteína*



**Justifiquen su respuesta con base en los criterios expuestos:** según los criterios expuesto se puede decir que la proteína 3IK3 tiene mejor calidad para poder realizar docking molecular, porque:

- Esta proteína tiene ligandos identificados dentro de su estructura, solo la 1K1F no tiene ligandos, su calidad no es buena.
- La calidad del ligando no es tan buena, solo la proteína 3OY3 tiene buena calidad de ligando, pero su resolución y R-libre no son tan buenos.
- Todas las proteínas tienen el método de cristalización por difracción de rayos X.
- En cuanto a la resolución esta proteína seleccionada es la que esta más alejada a 3Å, es decir, que va a tener una mayor resolución.
- En cuanto a la calidad del modelo de la proteína, R-libre esta en el rango, sin embargo, la proteína 4AGW tiene mejor R-libre, pero su resolución esta más cercano a 3Å.

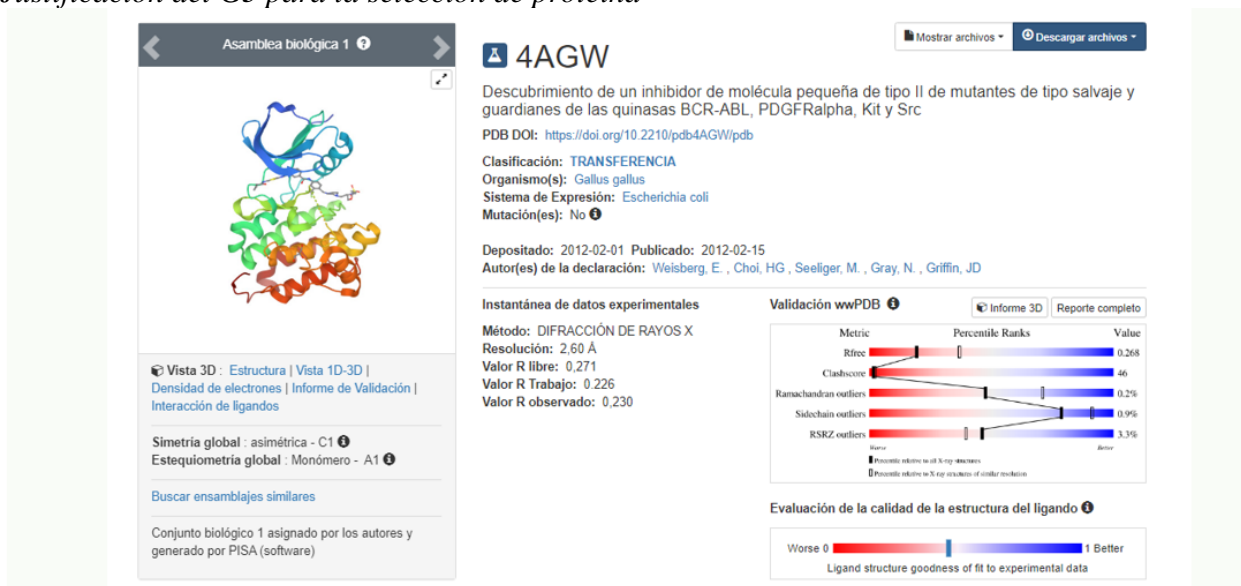
Fuente: Reto 1 del G1

Por otra parte, el G1 -como se observó en la figura 18- que seleccionó la proteína de buena calidad, menciona que: “*al tener una resolución más alejada de 3Å...va a tener mayor resolución*” que es una afirmación incorrecta. En ese sentido, ese fue la interpretación que los hizo seleccionar a la proteína 3IK3 en lugar de la 3OY3 que como ellos mismos mencionan “*tiene buena calidad de ligando*”. Sin embargo, el resto de las justificaciones son correctas y presentan un análisis conforme a los criterios presentados.

Por otra parte, el G3 que plantea que la proteína de mayor calidad es la 4GWA postula como criterio de selección que los criterios se encuentran “*más hacia el color azul*”-véase figura 19-, además presenta el mismo inconveniente que el G1 puesto que sugiere que tiene la mejor resolución entre las cuatro proteínas y en realidad esta es la que tiene peor resolución de las 4.

## Figura 19

### Justificación del G3 para la selección de proteína



**JUSTIFICACIÓN:** Se escogió esta proteína según los criterios establecidos en el vídeo, ya que, como se puede observar en la imagen se encuentra a comparación de las otras más hacia el color azul, presenta ligandos, el método de cristalización fue por difracción de rayos X, la resolución de la proteína es de 2.60 Å, siendo esta entre los cuatro el mayor valor y el R-libre es de 0.271.

Fuente: Reto 1 del G3

En conclusión, si bien es cierto que dos de los grupos no cumplieron con el objetivo por una mala comprensión de la información provista, el reto 1 arroja resultados favorables en cuanto al reconocimiento e identificación de herramientas básicas de PDB. Puesto que seleccionaron con base en criterios específicos las proteínas más adecuadas para el trabajo con docking molecular.



## Del Reto 2

En este reto, el objetivo era desarrollar en los estudiantes la capacidad de dominar herramientas básicas tanto de bases de datos como PDB y Pubchem como del software Avogadro para la optimización energética de los ligandos. Por lo que los docentes debían descargar las proteínas (formato PDB) y los ligandos (.sdf). Posteriormente, optimizando los ligandos con el programa Avogadro y subiéndolos a la plataforma en formato: .mol2. Además de hacer una propuesta sobre el ligando óptimo para tratar la LMC con base en la consulta de los ligandos propuestos en Pubchem.

En ese sentido, la evaluación se centra en los siguientes parámetros:

- El grupo descarga la proteína en el formato correcto: PDB
- El grupo descarga los ligandos propuestos en formato: .sdf
- El grupo realiza la estabilización energética en Avogadro y las descarga en formato: .mol2
- El grupo propone un posible ligando con base en una consulta

De lo que se encuentra que el 100% realiza la carga a la plataforma Moodle de la proteína 3OY3 en formato PDB. Frente al segundo parámetro los docentes cargan de manera correcta los ligandos en formato .sdf. En cuanto a la estabilización de las moléculas sólo un grupo no realiza la estabilización de las moléculas que corresponde al 14,3%, los otros seis grupos realizan la carga de la molécula en formato .mol2. Lo que corresponde a un 85,7%. En ese sentido, como los grupos de docentes debían realizar las tareas mencionadas anteriormente, era vital que ellos pudieran dominar las herramientas básicas comprendiendo sus funciones dentro del entorno del software, tanto de las bases de datos (PDB y PubChem) como del software Avogadro como lo propone Fandos (2003). Por lo que se puede decir que en su totalidad las actividades tuvieron una respuesta positiva referentes al segundo criterio propuesto.

Por otra parte, los docentes debían proponer con base en una consulta en Pubchem de los cuatro ligandos propuestos cuál considerarían que sería el más efectivo entre: El alfa tocoferol, el Ponatinib, el PBA2, el CD200 y el JNJ-26854165. Para plantear cuál era el más efectivo, se propusieron los ligandos según el estudio de Gomari et al., (2021), en el que se propone como control al Ponatinib y los resultados que se esperan en las propuestas de los ligandos (se adjunta el código de identificación de PubChem de cada uno) del reto 2 son:

- Ponatinib (Mayor eficacia): CID 24826799
- JNJ-26854165: CID 11609586
- Alfa tocoferol: CID 20353
- PBA2: CID 136263955
- CD200: CID 4715254

Por lo que considerando el estudio de Gomari et al., (2021) se propuso la anterior organización. Para asignar la posición del alfa tocoferol, la autora realizó una prueba de docking molecular que arrojó como resultado que como ligando puede tener un rendimiento similar al JNJ-26854165 en el docking molecular, siendo superado por el Ponatinib -véase figura 20-. Por lo que los tres ligandos de mayor rendimiento en orden de mayor a menor son: Ponatinib, JNJ-26854165 y Alfa Tocoferol.

**Figura 20**

*Resultados de docking molecular de la autora para realizar comparaciones del posible rendimiento de los ligandos*

Ligand	Binding Affinity (kcal/mol) »	Mode	RMSD lower bound	RMSD upper bound
3oy3limpia_24826799	-8.5	0	0.0	0.0
3oy3limpia_24826799	-8.3	1	31.22	34.103
3oy3limpia_24826799	-8.2	2	23.378	25.6
3oy3limpia_24826799	-8.1	3	27.189	29.96
3oy3limpia_24826799	-8.1	4	28.073	29.27
3oy3limpia_24826799	-8.1	5	3.919	12.727
3oy3limpia_24826799	-8.0	6	8.088	12.137
3oy3limpia_PBA2_CID136263955	-7.9	0	0.0	0.0
3oy3limpia_24826799	-7.9	7	65.275	70.189
3oy3limpia_24826799	-7.8	8	33.91	35.955
3oy3limpia_PBA2_CID136263955	-7.6	1	3.472	6.7
3oy3limpia_20353	-7.5	0	0.0	0.0
3oy3limpia_PBA2_CID136263955	-7.4	2	53.881	57.065

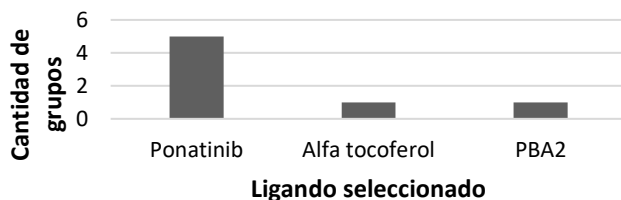
Fuente: Obtenido a partir de PyRx

Para la pregunta “¿Cuál sería el ligando más efectivo para el tratamiento de la LMC?” los resultados encontrados en las respuestas de los estudiantes posicionan al Ponatinib como el ligando más efectivo para el tratamiento de la LMC, posteriormente postulan JNJ-26854165 y hay un solo grupo que posiciona al alfa tocoferol como el ligando más efectivo para el tratamiento de la LMC. Como se puede observar en el diagrama de frecuencias de la figura 21 con base en sus consultas en PubChem los grupos propusieron mayoritariamente al Ponatinib, uno de los grupos propone al Alfa Tocoferol, sin embargo, aclaran que las potencialidades de este no son comparables con la eficacia del Ponatinib, lo que se esperaba como resultado, considerando que el Ponatinib es uno de los medicamentos con los que se trata la LMC.

**Figura 21**

Fuente: Elaboración propia

*Ligando más postulado por los grupos como el más eficaz por el tratamiento de la LMC*



Por ejemplo, se encuentra esta justificación del G2:

*“En este caso el tocoferol actúa como un fármaco para enfermedades como el cáncer, lo que podría significar que con otro sustituyente esta molécula podría ayudar al tratamiento de la Leucemia. Sin embargo. La plataforma es más específica en cuanto al Ponatinib, pues afirma que funciona específicamente para el tratamiento de enfermedades degenerativas, sin embargo, no especifica en cual.”*

No obstante, esta definición se inclina por las generalidades de los medicamentos. Por otra parte, dos de los grupos usaron justificaciones más precisas respecto al uso del Ponatinib como potencial tratamiento para la LMC, como es el caso del G4 que incluso buscaron fuentes externas para complementar la información:

*“Es un medicamento indicado para el tratamiento de pacientes adultos con leucemia mieloide crónica (LMC) en fase crónica, fase acelerada o fase blástica que es resistente o intolerante a la terapia previa con inhibidores de la tirosina cinasa o leucemia linfoblástica aguda con cromosoma Filadelfia positivo. (PubChem, s.f.). Pese a que tiene efectos secundarios graves, se usa solamente para tratar pacientes con LMC si todos los otros inhibidores de la tirosina cinasa no han funcionado o si las células de la leucemia presentan un cambio genético llamado mutación T315I (American Cancer Society, 2021). Ponatinib es un potente ITK oral, activo contra el BCR-ABL1 mutado y no mutado, incluyendo la mutación T315I (Bendek, 2015).”*

Esta respuesta presenta una postura mucho más completa sobre el porqué el Ponatinib sería el tratamiento más eficaz y lo relaciona con sus orígenes genéticos como: el cromosoma Filadelfia y la proteína BCR-ABL. En resumen, el reto 2 permitió identificar el correcto dominio y uso de las herramientas básicas de las bases de datos y el software Avogadro. Además, como valor agregado se encuentra que los estudiantes con base en la consulta y su información sobre la LMC pueden hacer posibles propuestas de ligandos más favorables para su tratamiento.

### **Del Reto 3**

En este reto, el objetivo era verificar lo aprendido en los videos de optimización de proteínas y que pudiesen comparar su propuesta de ligando más efectivo para el tratamiento de la LMC realizando el docking molecular y verificar si coinciden con su propuesta del reto 2. Este objetivo está en consonancia con el tercer criterio propuesto por Fandos (2003): Comprender cómo utilizar las herramientas para desarrollar tareas simples o resolver problemas. Para empezar, una de las tareas que tenían que realizar era seleccionar la cadena más apta la proteína para realizar el docking molecular y posteriormente eliminar las moléculas de agua para poder tener un estado ideal de la proteína y no generar falsos positivos como lo postulan Ballón Paucara, Wendy Guadalupe, & Grados Torrez, Ricardo Enrique (2019).

Posteriormente, los estudiantes debían realizar el proceso de Docking molecular e identificar al ligando de menor energía para finalmente comparar su resultado con la propuesta de ligando que

realizaron en el reto 2. Como se presenta en la figura 22, el 100% de los estudiantes seleccionaron la cadena adecuada para realizar el docking molecular.

## Figura 22

*Grupos que seleccionaron la cadena apropiada para realizar el docking*

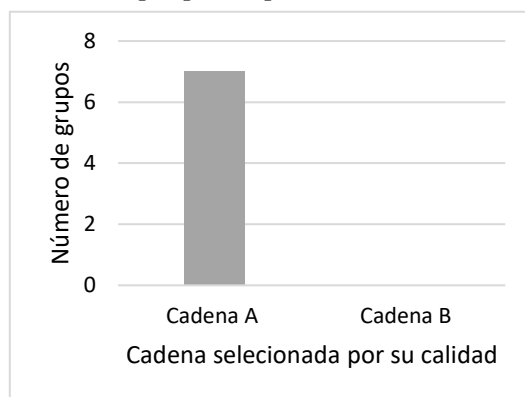


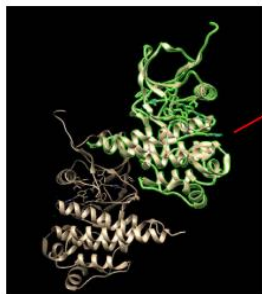
Figura: Elaboración propia

Lo que da cuenta que los estudiantes comprendieron cómo seleccionar las cadenas más adecuadas para poder utilizar en el docking molecular gracias al uso de la guía suministrada. Anexo a esto, se les solicitó que realizarán la optimización de la proteína energéticamente hablando por medio del programa Chimera UCFS. En este ejercicio, también el 100% realizó la eliminación de la cadena y de las moléculas de agua para poder trabajar con la proteína limpia. Como se puede observar en el ejercicio realizado por el G4, -véase la figura 23- los estudiantes presentaron las evidencias pertinentes para poder identificar si habían realizado bien el ejercicio.

## Figura 23

*Evidencia del Reto 3 Realizada por el G4*

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	284	80%
1	B	284	77%



La cadena con menos calidad y seleccionada para eliminar fue el B, en la tabla anterior se puede evidenciar, donde se observa que la cadena B presenta menor porcentaje (color verde).



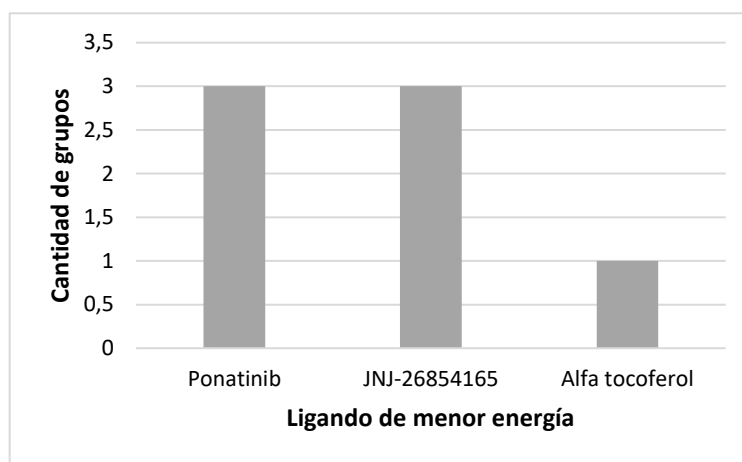
Se puede encontrar la proteína limpia, sin la cadena B y sin los átomos de agua.

Fuente: G4.

Finalmente, los grupos de docentes realizaron el ejercicio de Docking molecular en PyRx. Los resultados que arrojó el docking molecular les permitieron realizar un contraste entre el ligando que habían propuesto y sus resultados en el docking. En la figura 24, se pueden observar los resultados principales, que corresponden de hecho a lo planteado por Gomari et al., (2021) y el resultado de docking realizado por la autora -como se observó en la figura 20-. En el que los ligandos más estables en la conformación ligando-proteína son: El Ponatinib, el JNJ-26854165 y Alfa Tocoferol.

## Figura 24

### Resultados del Docking Molecular de los 7 Grupos



Fuente: Elaboración propia

Por lo que los resultados obtenidos por los grupos se encuentran relacionados directamente con los trabajos teóricos que sustentan este trabajo. Lo que se presenta como un resultado positivo, puesto que todos los grupos lograron obtener el rendimiento que se esperaba. Lo que al referirnos al criterio de Fandos (2006) sobre la comprensión de cómo utilizar las herramientas para el desarrollo de tareas simples se puede cumplir favorablemente. Además, los estudiantes logran interpretar sus datos puesto que al leer las justificaciones de si habían coincidido su propuesta con sus resultados del docking, se encuentran justificaciones que proponen posibles causas por las que los resultados no son los mismos, un ejemplo de esto es la justificación del G4 -cuyos valores se encuentran reportados en la figura 25-.

Quienes señalan que:

*G4: "El ligando de menor energía es el JNJ-26854165 (Compound CID: 11609586) con -8.6 kcal/mol, sin embargo, el Ponatinib (Compound CID: 24826799) también presenta una energía baja por lo que también es muy estable, y en los dos casos los ligandos presentan una conformación de 0.0. La molécula propuesta en el reto 2 fue Ponatinib por lo tanto si coincide, teniendo en cuenta*

los resultados obtenidos en el docking molecular, confirmándose que el Ponatinib es el compuesto más efectivo para el tratamiento de la leucemia mieloide crónica”.

## Figura 25

Resultado de docking molecular del G4

Ligand	Binding Affinity (kcal/mol) »	Mode	RMSD lower bound	RMSD upper bound
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_11609586	-8.6	0	0.0	0.0
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_24826799	-8.4	0	0.0	0.0
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_11609586	-8.4	1	1.425	2.037
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_24826799	-8.3	2	19.613	21.769
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_24826799	-8.3	1	31.602	32.693
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_11609586	-8.3	2	1.782	3.368
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_24826799	-8.1	3	31.714	32.711
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_24826799	-7.8	4	26.627	30.508
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_11609586	-7.8	4	27.866	31.653
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_11609586	-7.8	3	31.687	33.5
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_24826799	-7.7	7	24.489	25.994
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_24826799	-7.7	6	28.258	31.306
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_24826799	-7.7	5	11.572	17.416
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_11609586	-7.7	5	22.744	24.831
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_24826799	-7.6	8	2.545	3.533
3oy3_proteína_limpia_Conformer3D_CID_11609586	-7.5	6	29.121	30.963

Fuente: Tomado del reto 3 del G4

E incluso para aquellos que propusieron al Ponatinib como ligando en el reto 2 proponen justificaciones relacionadas a la estabilidad del complejo ligando-proteína, como se puede observar en la justificación del G6, lo que denota, no sólo un dominio de las herramientas sino también una comprensión de los procesos que se están efectuando por medio de ella.

G6: “Sí, ya que presenta una mejor afinidad es decir al tener una baja energía (-10,1) presenta una mayor estabilidad, además surge un acoplamiento entre el ligando y la proteína para poder formar el docking molecular, generando una macromolécula más estable”.

En definitiva, los resultados del docking de los docentes en formación son una forma de comprobar que la progresión de los criterios propuestos por Fandos (2006) favorecen en gran medida el fortalecimiento de competencias investigativas como “saber utilizar programas específicos de su campo profesional”. En cuanto al posible impacto que dicha competencia podría tener en las prácticas profesionales de los estudiantes, se analizarán el reto 4 y la prueba de salida para determinarlo.

## Del Reto 4

El objetivo de la actividad es enfrentar a los docentes en formación al reto de reflexionar otros posibles usos de las herramientas bioinformáticas presentadas para que los integren a sus prácticas docentes. Por tal motivo, se solicitó que propusieran una actividad que integrara las herramientas bioinformáticas para la enseñanza de un concepto de bioquímica, por lo que debían seleccionar un concepto, una población, los conocimientos previos que debían tener en cuenta para la aplicación, un objetivo de aprendizaje que se pudiese conseguir por medio de la aplicación, las herramientas bioinformáticas que se podrían integrar a la actividad y postular una posible metodología. -Como se puede observar en la tabla 13-.

### Tabla 13

*Formato para la Propuesta de Actividades Mediadas por Herramientas Bioinformáticas*

<b>Propuesta de actividad mediada por herramientas bioinformáticas</b>	
<b>Integrantes del grupo:</b>	<b>Concepto:</b>
1.	
2.	
3.	
4.	
<b>Población:</b>	<b>Conocimientos previos:</b>
<b>Objetivo de aprendizaje:</b>	<b>Herramientas bioinformáticas seleccionadas:</b>
<b>Descripción de la actividad y su metodología integrando a las herramientas bioinformáticas:</b>	

Fuente: Elaboración propia

Para la evaluación de esta actividad, se realizó una rúbrica que se centrará más que en los conceptos en las relaciones entre ítems propuestos, puesto que como se dejó a criterio de los docentes en formación la selección del concepto no se podría realizar una evaluación objetiva. Puesto que, para los fines de este trabajo, lo determinante sería la integración de las herramientas bioinformáticas y sí se usaban de forma adecuada para el desarrollo de las actividades ya que el objetivo era como lo señala Fandos (2006) que al final los docentes en formación fuesen capaces de apreciar la base del aprendizaje on-line y el potencial de la web y de Internet para el aprendizaje. Por lo que para esto se propone una rúbrica de evaluación -véase tabla 14-.

**Tabla 14***Rúbrica de Evaluación del Reto 4*

Criterios	Excelente 5	Buena 4	Aceptable 3	Regular 2	Insuficiente 1
<b>Relación de conocimientos previos con el concepto seleccionado</b>	Los conocimientos previos responden completamente a la base conceptual que requieren los estudiantes para abordar la temática	Los conocimientos previos responden en gran medida a la base conceptual que requieren los estudiantes para abordar la temática	Los conocimientos previos responden medianamente a la base conceptual que requieren los estudiantes para abordar la temática.	Los conocimientos previos no responden a la base conceptual que requieren los estudiantes para abordar la temática	Los conocimientos previos no corresponden a la base conceptual que requieren los estudiantes para abordar la temática.
<b>Incluye herramientas bioinformáticas</b>	Incluye cuatro herramientas bioinformáticas en el desarrollo de la actividad.	Incluye tres herramientas bioinformáticas en el desarrollo de la actividad.	Incluye dos herramientas bioinformáticas en el desarrollo de la actividad.	Incluye una herramienta bioinformática en el desarrollo de la actividad.	No incluye herramientas bioinformáticas en el desarrollo de la actividad.
<b>La actividad que propone se relaciona con el objetivo de aprendizaje</b>	La actividad permite el completo desarrollo del objetivo planteado.	La actividad permite un buen desarrollo del objetivo planteado.	La actividad permite un desarrollo medio del objetivo planteado.	La actividad permite un desarrollo regular del objetivo planteado.	La actividad permite un desarrollo insuficiente del objetivo planteado.
<b>Calidad de la actividad</b>	<b>15 excelente calidad</b>	<b>14-13 Buena calidad</b>	<b>12-10 Calidad intermedia</b>	<b>9-5 Baja calidad</b>	<b>4 Mala calidad</b>

Fuente: Elaboración propia

En ese sentido, se encuentra una tendencia por la enseñanza de conceptos como: aminoácidos y proteínas. Sin embargo, los abordajes son muy diferentes. Por tal motivo, se presenta el balance general de las puntuaciones obtenidas en la rúbrica respecto a la calidad de las actividades planteadas por los docentes en formación obtenidas a partir de SPSS Statistics -véase la tabla 15-.

**Tabla 15***Compendio de resultados obtenidos en SPSS Statistics para la Rúbrica de Evaluación de Calidad del Reto 4*

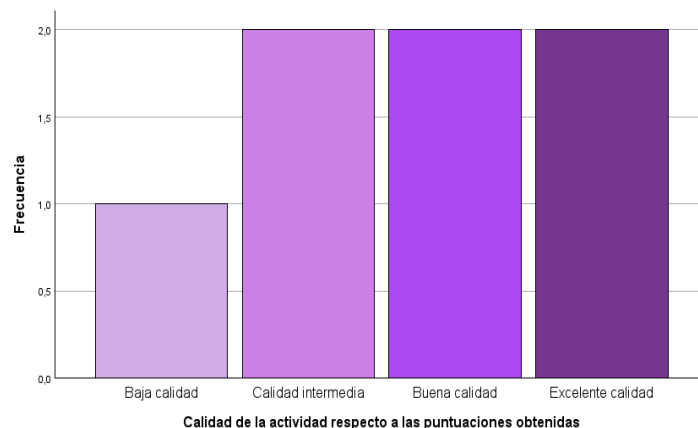
	Frecuencia	Porcentaje	Porcentaje válido	Porcentaje acumulado
Válido Baja calidad	1	14,3	14,3	14,3
Calidad intermedia	2	28,6	28,6	42,9
Buena calidad	2	28,6	28,6	71,4
Excelente calidad	2	28,6	28,6	100,0
Total	7	100,0	100,0	

Fuente: Realizado a partir de SPSS Statistics.



## Figura 26

### Resultados de la Rúbrica Aplicada al Reto 4



Fuente: Realizado a partir de SPSS Statistics

Por lo que de los 7 grupos: dos presentaron actividades de excelente calidad, dos de buena calidad, dos de calidad intermedia y uno de baja calidad. En tal efecto, considerando que el 57,2% de los estudiantes realizaron propuestas en las que integraron todos los ítems de forma conectada e integrando las herramientas bioinformáticas como facilitadoras para el cumplimiento del objetivo de sus actividades, se puede considerar entonces como un impacto positivo en su reflexión pedagógica, ya que pueden considerar a dichas herramientas como facilitadoras en el proceso de enseñanza aprendizaje de su disciplina. En este caso puntual de la bioquímica, así pues, los docentes en formación pudieron encontrar desde sus diferentes grupos potencialidades diferentes a las herramientas bioinformáticas.

Puesto que, como lo afirma Cruz Rodríguez, el docente es el responsable de encontrar las oportunidades de aprendizaje en las TIC y de hacerlas parte de sus ejercicios docentes para aumentar las posibilidades de aprendizaje de los estudiantes que hacen parte de sus clases. Además de que su uso prolongado y eficaz favorece que los estudiantes adquieran habilidades o competencias específicas (2018). Además de ser un transformador de la praxis tradicional de enseñanza a nuevas estrategias pedagógico-didácticas más efectivas y que representen innovación. Por ejemplo, integrando actividades asincrónicas en plataformas o en aplicativos que permitan que el estudiante en un momento libre pueda acceder a resolución de dudas o momentos de práctica, sin las limitaciones que posee la educación presencial de no ofertar otras posibilidades diferentes a las clases (González, 2018, párr. 53 citado en Cruz Rodríguez, 2018).

En consecuencia, la integración de este tipo de tecnologías suscita también la creatividad de los docentes en formación en cuanto a la planeación de actividades. En vista de que, los docentes deben realizar un proceso de selección de la información que generará el contexto y consolidar un

encadenamiento en las actividades que favorezca la resolución de problemas derivados de la realidad (González, 2018, párr. 53 citado en Cruz-Rodríguez, 2018). Respondiendo a esta visión, se encuentra el trabajo presentado por el G1 en el que se propone una actividad para la enseñanza de la importancia de los aminoácidos en la salud de los felinos. Una actividad que se destaca por ser sumamente diferente y que está planteada para ser desarrollada mediada por tres diferentes herramientas bioinformáticas, lo que presenta un ejemplo de las potencialidades que encontraron los docentes en formación en dichas herramientas esbozando apenas con una actividad cómo las incluirían en el desarrollo de sus clases. -véase figura 28 y 29-

**Figura 28**

*Primera parte de la actividad presentada por el G1 para el reto 4*

<b>Propuesta de actividad mediada por herramientas bioinformáticas</b>	
<b>Integrantes:</b> 1. Manrique Rodríguez Diego Alejandro 2. Suárez Peña Yeris Alejandra 3. Zabala Paula Andrea	<b>Concepto:</b> <b>Aminoácidos</b> Importancia de los aminoácidos y su relación con la salud en felinos.
<b>Población:</b> Estudiantes de grado 11° que estén desarrollando curso de bioquímica.	<b>Conocimientos previos:</b> - Reconocimiento de grupos funcionales orgánicos - Estudio de aminoácidos y su clasificación - Reconocimiento de la importancia de los aminoácidos en proteínas para el cumplimiento de funciones vitales en el cuerpo
<b>Objetivo de aprendizaje:</b> Describir el efecto del consumo de Taurina en la alimentación Felina y su posible tratamiento farmacológico.	<b>Herramientas bioinformáticas seleccionadas:</b> - PubChen - PDB - Drulito
<b>Descripción de la actividad y su metodología integrando a las herramientas bioinformáticas:</b> <b>Introducción.</b> Los felinos domésticos requieren de una alimentación rica en proteínas para obtener aminoácidos esenciales que les permiten tener un crecimiento, desarrollo y mantenimiento de sus funciones corporales. Pero a diferencia de los perros u otras especies, los gatos presentan un metabolismo proteico muy acelerado, es decir, las enzimas encargadas de la metabolización de las proteínas y de los compuestos nitrogenados especialmente, tienen una alta actividad aun cuando el consumo de proteína sea bajo (AMINLARI et al., 2007; RUSSELL et al., 2000) citado por Osorio y Cañas (2012). Adicionalmente el felino doméstico requiere de mayores cantidades de algunos aminoácidos esenciales, debido a que su cuerpo carece de procesos enzimáticos para sus síntesis. Uno de los aminoácidos más importantes para los gatos es la <b>Taurina</b> , un aminoácido azufrado presente en los tejidos de animales, especialmente aves y pescados. Este aminoácido permite la conjugación de los ácidos biliares uniéndose a ellos para emulsificar los lípidos y nivel intestinal y proceder a su digestión. Conforme a ello, este aminoácido también participa en la función cardíaca, retiniana, cuidado del sistema nervioso y reproductivo. Una deficiencia de este aminoácido en la alimentación felina produce pérdida de la agudeza visual, falta de control del sistema inmune, fallas reproductivas, cardiomiopatías y alternaciones neurológicas como la epilepsia que provoca convulsiones.	

Fuente: G4

## Figura 29

Segunda parte de la actividad presentada por el G1 para el reto 4



En continuidad con lo mencionado anteriormente, es necesario brindar una buena alimentación a los felinos, no reducirlos a alimentaciones vegetarianas ni a concentrados que no aporten estos aminoácidos esenciales. Para este fin es importante analizar la relación costo-beneficio del concentrado para un felino, no por ser más caro en términos monetarios, significa que presenta una mayor proporción de aminoácidos y proteína.

Uno de los efectos más comunes en gatos con deficiencia de Taurina, es la presencia de convulsiones procedentes de la epilepsia, su tratamiento incluye medicamentos como la Fenobarbital para reducir la frecuencia e intensidad de los ataques, permitiendo prevenir las convulsiones continuas por más de 10 minutos.

### Metodología

#### taurina



1. La primera actividad a realizar es el reconocimiento de la Taurina en la base de datos molecular **PubChem**, esta aplicación permite conocer algunas propiedades básicas del aminoácido, como su metabolismo, obtención, estructuras 2D, 3D y cristalina, dentro del cual se pueden comprender estructuras, reconocimiento de grupos funcionales, tipos de enlaces presentes y la importancia de este aminoácido en el cuerpo.

2. La segunda actividad consiste en el análisis del **Fenobarbital** como fármaco para el control de la epilepsia en felinos, para ello se emplea el uso de la base de datos **PDB** con el fin de realizar una validación de los rangos de análisis de la proteína, su estructura tridimensional, reconocimiento de aminoácidos y la estructura de la proteína



3. Finalmente se procede a pasar la molécula de Fenobarbital por Drulito para confirmar que el fármaco es apto para el tratamiento de epilepsia en gatos según la regla de Lipinski, debido a que este fármaco se encuentra estudiado para el ser humano y los estudios en felinos aun son muy reducidos.

### Referencias.

Osorio, J. H., & Cañas, E. Z. (2012). Fundamentos metabólicos en *Felis catus* linnaeus, 1758 (Carnivora: Felidae). Boletín Científico. Centro de Museos. Museo de Historia Natural, 16(1), 233-244.

Cañas D, Patricio. (2002). ROL BIOLÓGICO Y NUTRICIONAL DE LA TAURINA Y SUS DERIVADOS. Revista chilena de nutrición, 29(3), 286-292. <https://dx.doi.org/10.4067/S0717-75182002000300003>

Fuente: Reto 4 Grupo 4

Finalmente, esta actividad del G4 refleja positivamente cómo los docentes podrán entonces apreciar en la base del aprendizaje on-line el potencial de la web y de Internet para los procesos de enseñanza aprendizaje según la visión de Fandos (2006). Ya que se propuso como el indicador de impacto de la aplicación de este trabajo, puesto que el saber utilizar programas específicos de su campo disciplinar transgrede a espacios pedagógicos-didácticos, lo que torna el perfil de los docentes en formación en posibles investigadores educativos. Lo que se respalda en la visión de Ibarra, et al, que establece que:

*“Es indiscutible la necesidad del binomio investigación y TIC, la alfabetización digital obliga al campo científico a la transformación epistemológica nueva, de actualidad, inmediata y confiable, para lo cual todo educador debe estar capacitad... (...)... nos permite ver la necesidad que existe por parte del docente de realizar investigación aplicada a la educación de forma interactiva, que proponga cambios para despertar en el estudiantado interés y motivación en la realización de proyectos de investigación, brindando innovaciones a las organizaciones y a la sociedad a todos los niveles (local, nacional e internacional)”(2020, p.118).*

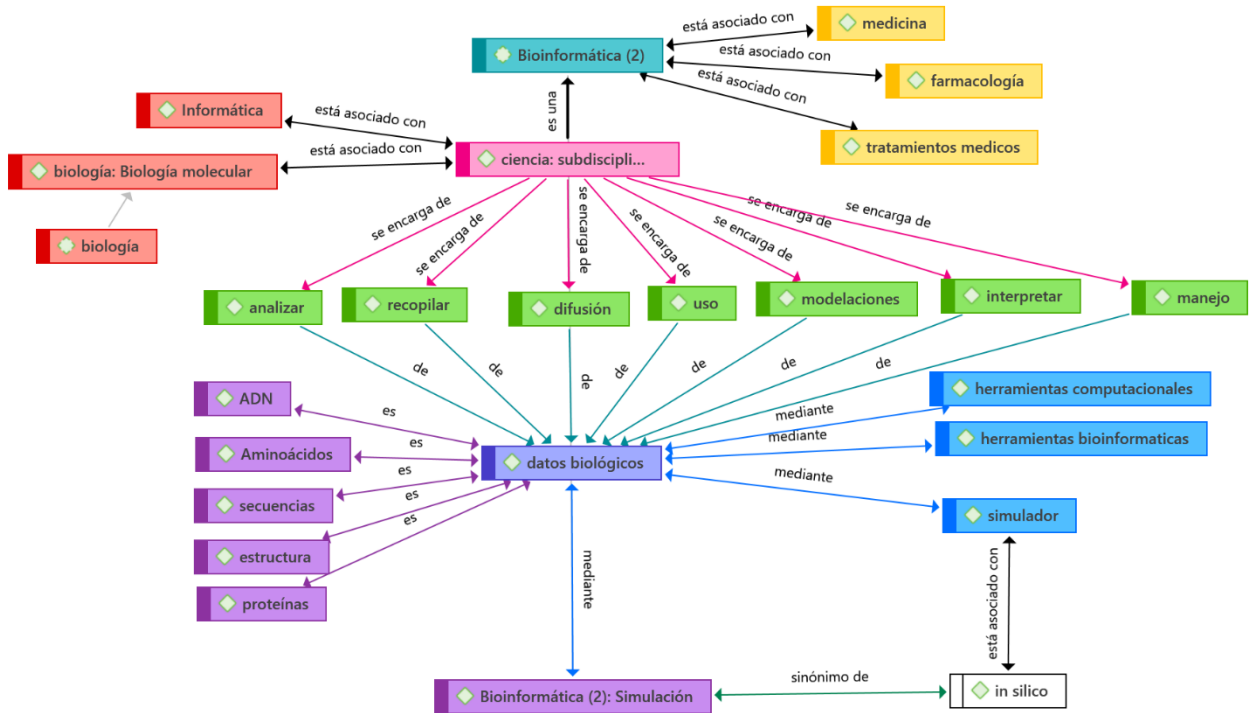
Por lo que se espera que los estudiantes puedan tener este tipo de impacto incorporando a las TIC como un dinamizador y metodología en sus clases.

### **De la prueba de salida**

La prueba de salida fue un instrumento que se utilizó de igual forma para medir el impacto de la intervención en diversas dimensiones. La primera dimensión fue la asimilación de conceptos como bioinformática y docking, en vista de que en un principio sólo un 15,5% (que corresponde a 5 docentes en formación) afirmaban tener conocimientos entorno a la bioinformática. Frente a este resultado, se solicita a los estudiantes que definan qué es la bioinformática con sus propias palabras. Para esto se utilizó el software Atlas ti para el análisis de las respuestas abiertas y se tomó como base la siguiente red estructural basada en la definición de *la National Human Genome Research Institute (2022)* pero considerando además que esta definición podía ser permeada por el ejercicio realizado por lo que se consideró agregar aplicaciones de la bioinformática como el tratamiento de enfermedades, medicinas y farmacología -véase la figura 30-.

**Figura 30**

*Red estructural construida entorno al concepto de bioinformática contemplando el contexto de la aplicación del taller.*



Fuente: Construido a partir de Atlas ti

Con base en esta red estructural se realizó un análisis general de las respuestas y uno particular. El general, está determinado por la frecuencia en la que en las definiciones de los docentes en formación se mencionaban ciertos códigos (que son todos aquellos que conforman la definición de bioinformática). En el particular, se realizó el contraste de definiciones iniciales de los estudiantes con las propuestas al final de la aplicación, considerando que el 84,5% no tenía conocimientos sobre qué era la bioinformática.

En la figura 30, se puede observar que los conceptos más mencionados son: herramientas bioinformáticas (encontrada en 18 respuestas), herramientas computacionales (21 respuestas), biología molecular (11 respuestas), datos biológicos (9 respuestas), tratamientos médicos (7 respuestas) y proteínas (6 respuestas).

**Figura31**

Tabla de frecuencias de códigos más mencionados en las respuestas abiertas según Atlas

ti

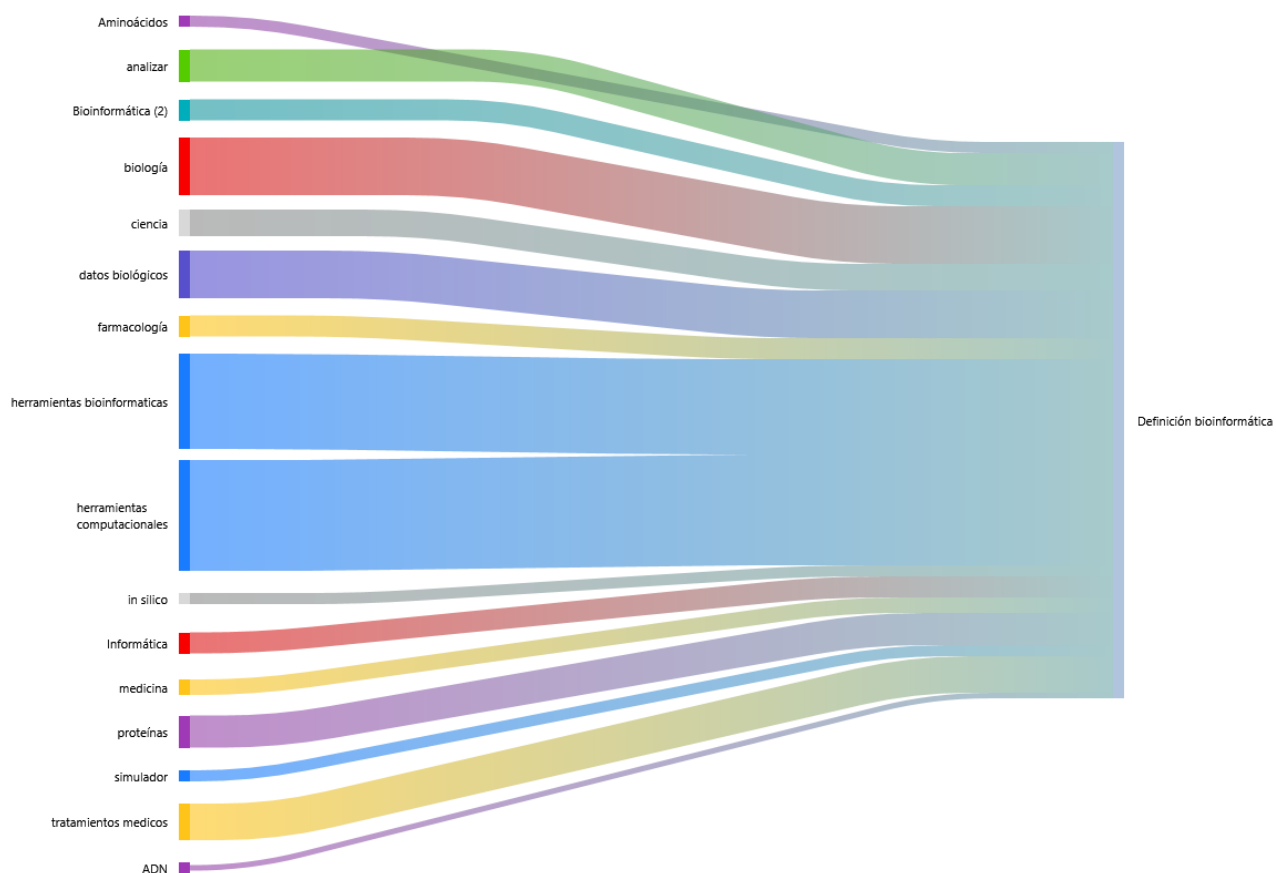
	4: Definición... 28	Totales
ADN 2	1	1
Aminoácid... 3	2	2
analizar 8	6	6
Bioinformá... 4	4	4
biología 11	11	11
ciencia 6	5	5
datos biol... 12	9	9
farmacolo... 4	4	4
herramient... 21	18	18
herramient... 23	21	21
in silico 3	2	2
Informática 4	4	4
medicina 3	3	3
proteínas 8	6	6
simulador 3	2	2

Fuente: Obtenido a partir de Atlas ti

Considerando que los estudiantes no tenían en su gran mayoría conocimientos sobre la bioinformática. Resulta un impacto positivo el que puedan describir nociones de lo qué, sobre sus posibles aplicaciones y su sujeto de estudio. En estos resultados generales, se puede apreciar que la definición de bioinformática que los docentes en formación propusieron fue permeada por el desarrollo del taller, en vista que, como se observa en la figura 30, se asoció en mayor medida con; las herramientas bioinformáticas y computacionales; con la biología molecular; con datos biológicos como proteínas y aminoácidos; y con posibles tratamientos. En la figura 31 se puede observar un diagrama de Sankey que permite identificar cómo se dio el flujo de conceptos en cuanto a volumen (número de menciones en las definiciones) que se encuentra indicado como una flecha de mayor grosor.

**Figura 32**

*Diagrama de Sankey construido a partir de la frecuencia de códigos encontrado en las definiciones de los docentes en formación*

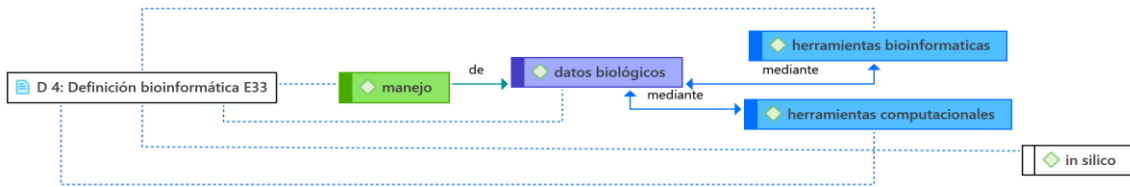


Fuente: Obtenido a partir de Atlas ti

Desde el aspecto particular, se toman las definiciones de los docentes E10 y E7 para compararlas con sus respuestas en el reto 1 con el objeto de determinar si hubo un progreso conceptual después de la aplicación del taller. Puesto que el E7, no tuvo un buen desarrollo conceptual en comparación con el E10, por lo que se pretende identificar si hubo progreso en ambos casos. Iniciando con el E7 que paso de una propuesta como: *“Herramientas bioinformáticas como Psipred y desde la química computacional Avogadro y Gabedit”* a una definición de bioinformática como: *“Nos permite investigar, desarrollar y aplicar herramientas informáticas y computacionales para permitir y mejorar el manejo de datos biológicos”*-véase la red estructural de la definición en la figura 32-. Lo que permite presuponer que el taller permitió realizar relaciones de conceptos y de esa forma poder postular definiciones que se acogen mucho más a la propuesta por la National Human Genome Research Institute (2022).

**Figura 32**

*Red estructural construida a partir de los conceptos encontrados en la respuesta del E7 después de la aplicación del taller*

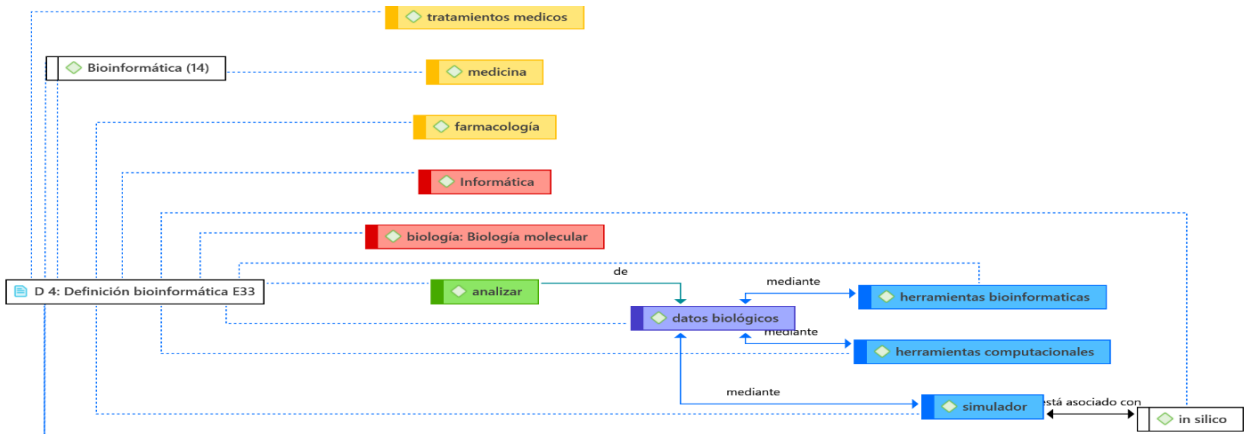


Fuente: Obtenido a partir de Atlas ti

También se observa que el E10 que postuló en un principio que la bioinformática es el "Análisis y difusión de datos biológicos, aplicación de herramientas computacionales" amplió su propuesta a la siguiente definición: "La Bioinformática une la biología molecular y la informática para analizar datos complejos mediante algoritmos, programas de computadora y herramientas estadísticas. Esto permite diversas aplicaciones, incluyendo la identificación de secuencias genéticas, diagnóstico de enfermedades, estudios evolutivos, modelado molecular y diseño de medicamentos. La Bioinformática es importante para la investigación en biología molecular y medicina personalizada, y los profesionales en esta área tienen formación en biología, informática, matemáticas o estadística y trabajan en diferentes sectores" -véase la red estructural construida a partir de la definición del E10 en la figura 33-.

**Figura 33**

*Red estructural construida a partir de los conceptos encontrados en la respuesta del E7 después de la aplicación del taller*



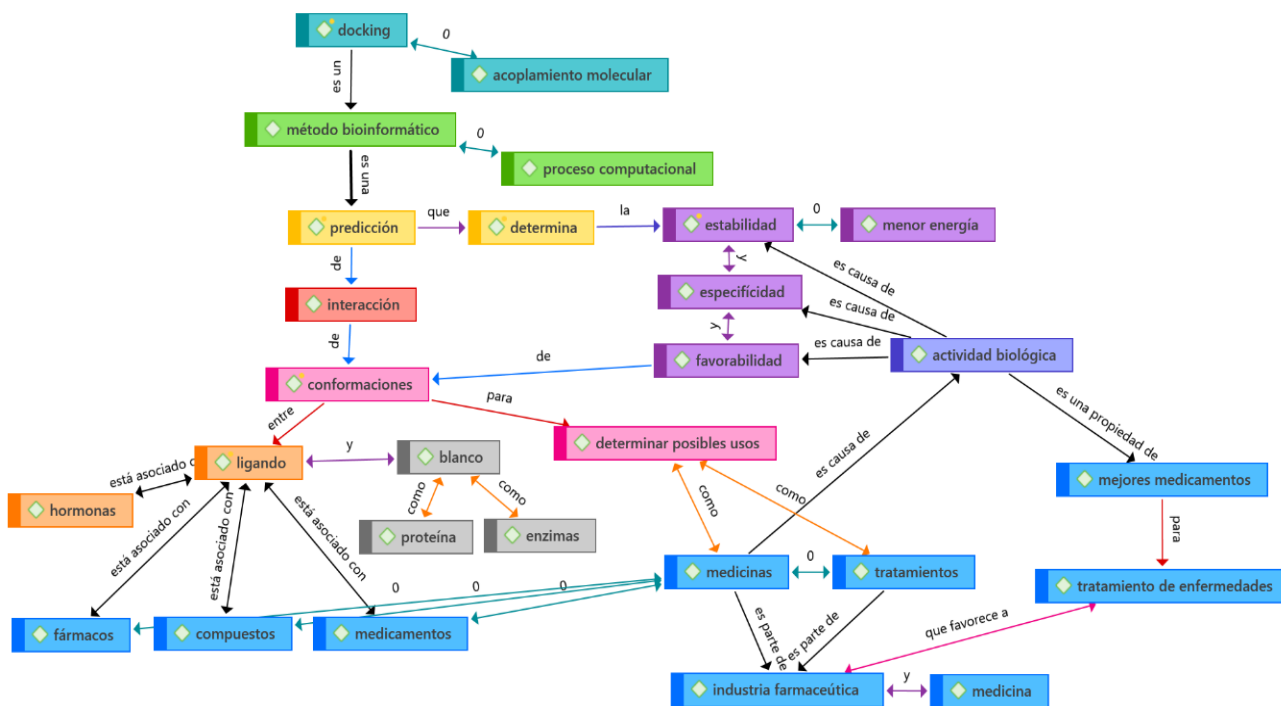
Fuente: Obtenido a partir de Atlas ti



En cuanto al concepto de docking se observó que 31 docentes en formación que correspondían al 94% de la clase no tenían conocimientos sobre docking o acoplamiento molecular. Por lo que se realiza inicialmente un análisis general de las definiciones mencionadas por los docentes en formación y de la frecuencia con que mencionaron conceptos para posteriormente realizar un diagrama de Sankey. Para esto se elaboró una red estructural de qué es el docking molecular con base en la definición postulada por Ballón Paucara y Grados Torrez (2019) -véase figura 34-

**Figura 34**

*Red estructural construida entorno al concepto de docking según la definición postulada por Ballon Paucara y Grados Torrez (2019)*



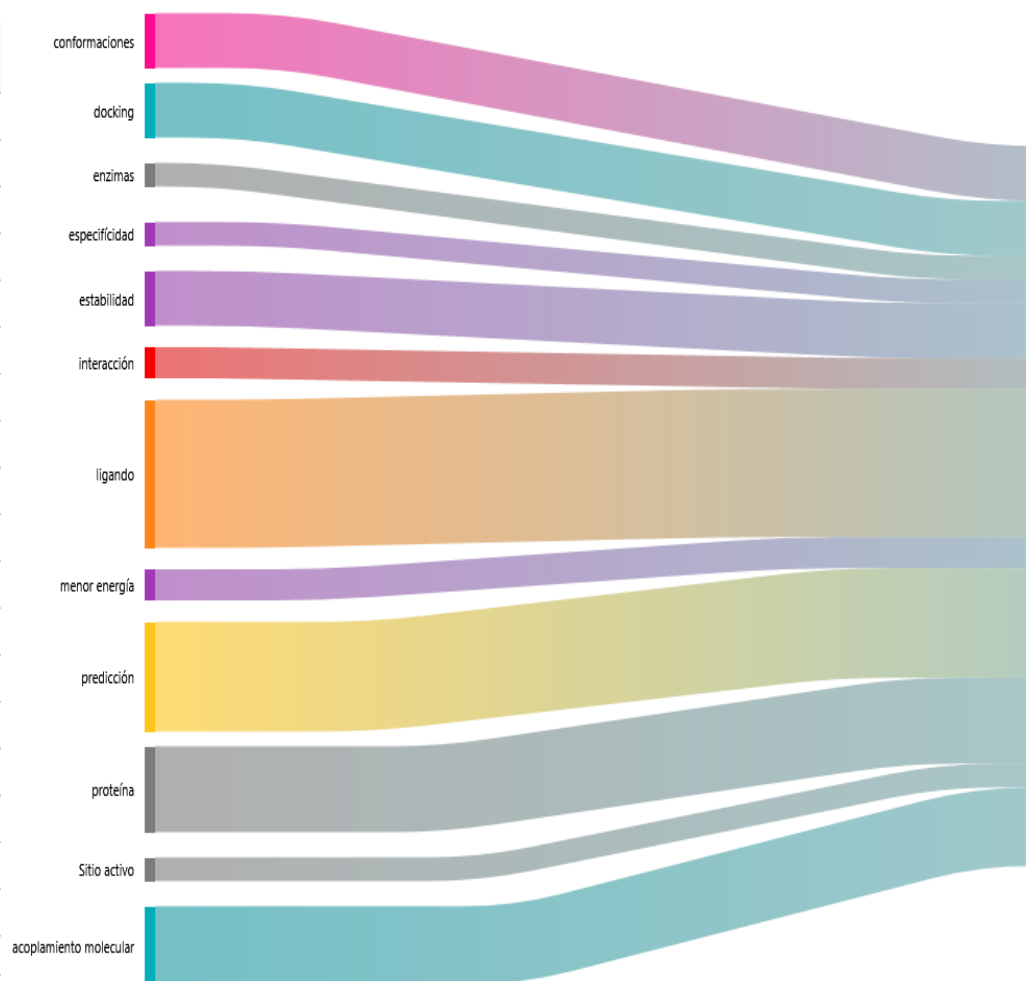
Fuente: Creado con base en la definición de Ballon Paucara y Grados Torrez (2019) en el programa Atlas ti

En la figura 35 se puede observar la tabla de frecuencias y el diagrama de Sankey construido a partir de dichas frecuencias de códigos que se encontraron en las definiciones postuladas por los estudiantes. Los conceptos más mencionados son: Ligando (19 menciones), predicción (14 menciones), proteína (11 menciones), acoplamiento molecular (10 menciones), conformaciones (7 menciones) y estabilidad (7 menciones). Cabe resaltar que las definiciones de docking son mucho más completas en comparación con las postuladas en torno a la bioinformática, lo que se presupone se encuentra relacionado con el hecho de que la aplicación en la que se centró el taller fue el docking molecular.

**Figura 35**

*Cuadro de frecuencias y diagrama de Sankey*

	2: Definición... 29	Totales
acoplamiento molecular	10	10
blanco	1	1
compuestos	1	1
conformaciones	7	7
docking	7	7
enzimas	3	3
especificidad	3	3
estabilidad	7	7
fármacos	1	1
herramienta	1	1
interacción	4	4
ligando	19	19
menor energía	4	4
método bioinformático	1	1
predicción	14	14
proceso computacional	2	2
proteína	11	11
Sitio activo	3	3
<b>Totales</b>	<b>99</b>	<b>99</b>

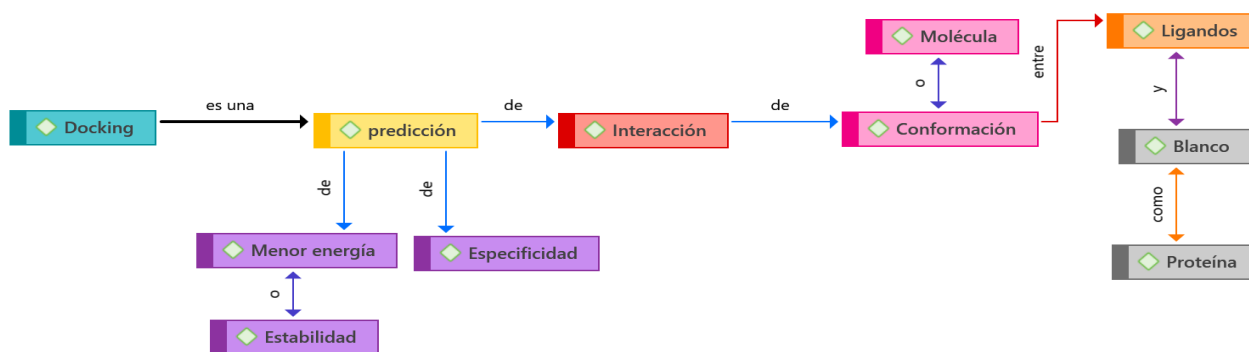


Fuente: Obtenido a partir de Atlas ti

En el análisis particular de algunas respuestas de los estudiantes se encuentran los siguientes postulados. El primero, corresponde al E19 que propone como definición de docking: “*El docking molecular es una técnica permite ver como interactúan los ligandos con una proteína en específico e identificar la molécula con menor energía, es decir, con mayor estabilidad y especificidad*”- véase la red estructural del E19 en la figura 36-. Se puede observar que las relaciones planteadas presentan relaciones bastante aproximadas a la definición utilizada como base postulada por Ballón Paucara y Grados Torrez (2019) ya que menciona la relación entre los ligandos y su posible actividad biológica, asociándola a su especificidad y su estabilidad energética al acoplarse con la proteína. Sin embargo, se puede observar que el E22 hace relaciones a su aplicación en el que incluye por ejemplo su uso como blancos terapéuticos.

**Figura 36**

**Red estructural construida entorno al concepto de docking por el E19 posterior a la aplicación del taller**

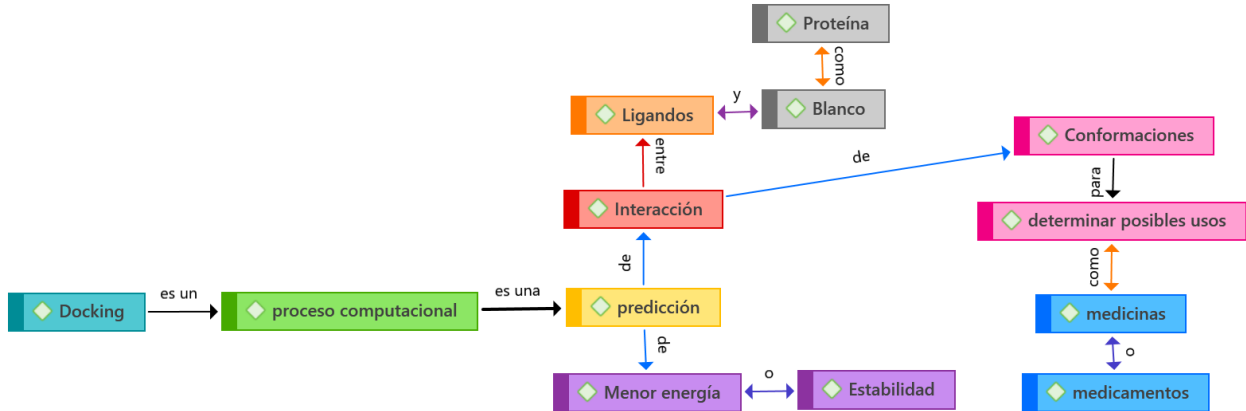


Fuente: Obtenido a partir de Atlas ti

En cuanto a la propuesta del E22 -véase figura 37- propone que el docking molecular: “*es una técnica computacional utilizada en química y bioquímica para predecir y analizar la interacción entre moléculas, como un ligando y una proteína. Su objetivo es estimar la posición y orientación más probable del ligando cuando se une al objetivo biomolecular, así como evaluar la energía y la fuerza de esta interacción. Es importante en el descubrimiento de medicamentos, ya que permite identificar compuestos que se unen específicamente a una proteína y pueden ser desarrollados como medicamentos. También se utiliza en investigaciones para comprender la estructura y función de las proteínas y estudiar las interacciones entre proteínas y otras moléculas biológicas*”. La anterior definición contiene mayores precisiones y permite identificar que el estudiante ha podido identificar claramente el objetivo de no sólo la actividad sino también del docking molecular como aplicación de la bioinformática, puesto que la secuencia de códigos es muy similar a la propuesta en la figura 34. Por lo que la actividad no sólo permitió que los estudiantes pudieran obtener una competencia técnicas de las herramientas bioinformáticas, sino también una comprensión de las aplicaciones que éstas pueden tener.

**Figura 37**

*Red estructural construida entorno al concepto de docking por el E22 posterior a la aplicación del taller*

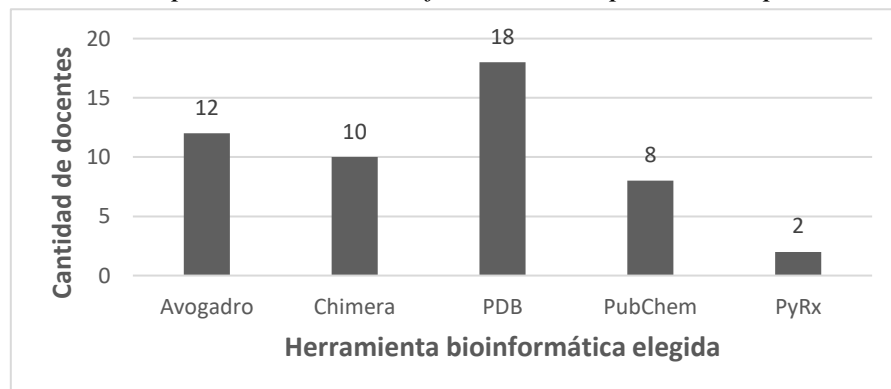


Fuente: Obtenido a partir de Atlas ti

Desde la dimensión de las competencias, se les preguntó a los docentes en formación sobre el software que más utilizarían después de la aplicación del taller y se obtuvo que a pesar de que los docentes continúan posicionando como una herramienta con alto potencial a Avogadro, en sus respuestas se integraron softwares como PDB (18 respuestas) en primer lugar, Chimera en tercer lugar (10 respuestas), Pubchem (8 estudiantes) e incluso PyRx (2 estudiantes) -véase la figura 38-. Lo que se puede postular como un posible impacto no sólo a sus vidas profesionales con la integración de herramientas actualizadas sino a su ejercicio docente puesto que también se les preguntó si integrarían estas herramientas a sus prácticas docentes.

**Figura 38**

*Programas más utilizados por los docentes en formación después de la aplicación del taller*



Fuente: Elaboración propia

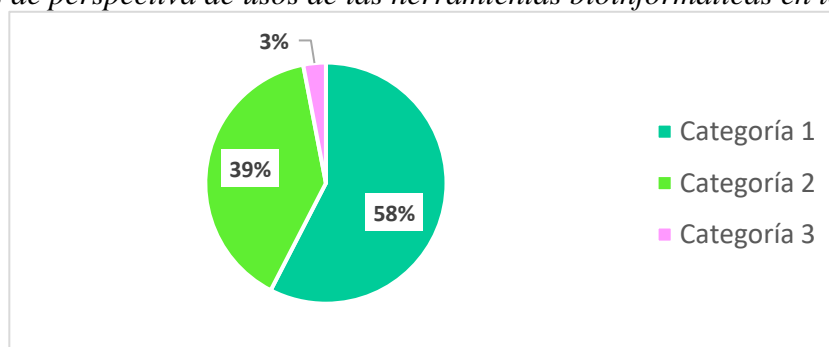
Por lo que a la pregunta: ¿Cómo considera que se puede incorporar la bioinformática en las aulas? ¿Cree que es una herramienta que se puede llevar a colegios? Los docentes en formación mencionaron tres tipos de respuestas que fueron clasificadas en tres categorías:

1. **Categoría 1:** En esta categoría se agruparon las respuestas de todos aquellos que consideran que sí son herramientas que se pueden integrar en niveles secundarios.
2. **Categoría 2:** En esta categoría se agruparon respuestas de todos aquellos que consideran que sí son herramientas que se pueden integrar en niveles secundarios, pero considerando el contexto pues reconocen que en Colombia la mayor parte de colegios públicos no cuentan con herramientas tecnológicas suficientes.
3. **Categoría 3:** No rotundo a la incorporación de estas herramientas.

Contemplando estas categorías, se realizó una gráfica que permite observar la clasificación de los resultados de los docentes en formación -véase figura 39-.

**Figura 39**

*Resultados de perspectiva de usos de las herramientas bioinformáticas en los colegios*



Fuentes: Elaboración propia

Ejemplos de las respuestas que se encuentran en la categoría 1 (con 19 respuestas) son:

**-E16:** *Considero que sí se puede llevar a aulas de colegio, ya que, partiendo de la vida cotidiana de los estudiantes, tratar los posibles tratamientos de enfermedades que los niños conozcan, generaría interés en diversos conceptos asociados a química y bioquímica*

**-E27:** *Introduciendo esta herramienta en los cursos de ciencias, también fomentando el uso de estas herramientas en la investigación de los estudiantes y creando proyectos interdisciplinarios donde los estudiantes entiendan como la bioinformática está conectada con las demás disciplinas.*

**-E33:** *La bioinformática es una herramienta que puede ser usada en el aula para hacer de la química menos abstracta en conceptos como la geometría molecular, la estructura de las proteínas y los enlaces que generan los átomos. Estas herramientas en compañía de una buena conceptualización pueden generar un mayor entendimiento y aprendizaje.*

En esta categoría, se mencionan aspectos destacables por parte de los docentes en formación como que la integración de las herramientas bioinformáticas podría aumentar el interés de los estudiantes. También que se podrían integrar a proyectos de carácter interdisciplinar con el objetivo de realizar investigaciones con los estudiantes de colegios y finalmente, se menciona que podrían generar un mayor entendimiento y ayudar con el aprendizaje.

En la categoría 2 (con 13 respuestas), se encuentran todos aquellos docentes en formación que consideran que si bien es cierto la integración de herramientas bioinformáticas es perfectamente adaptable a instituciones educativas de educación media, se debe contemplar el contexto, puesto que sin duda se requieren salas de cómputo dotadas y acceso a internet. Esta categoría, es una categoría que sigue siendo positiva puesto que plantea unos mínimos para la ejecución de actividades mediadas por las herramientas bioinformáticas. Se presentan a continuación algunas de las respuestas encontradas en esta categoría:

**-E8:** *Perfectamente. Sin embargo, es pertinente considerar si la institución posee del recurso tecnológico para poder utilizarlos. En el caso de que sí, sería un ambiente dinámico y novedoso para trabajar con el estudiantado.*

**-E23:** *Creo que, a pesar de estas herramientas presentan un gran potencial para la enseñanza de bioquímica, es muy difícil de desarrollar actividades con ellas en los colegios por falta de la infraestructura necesaria para eso.*

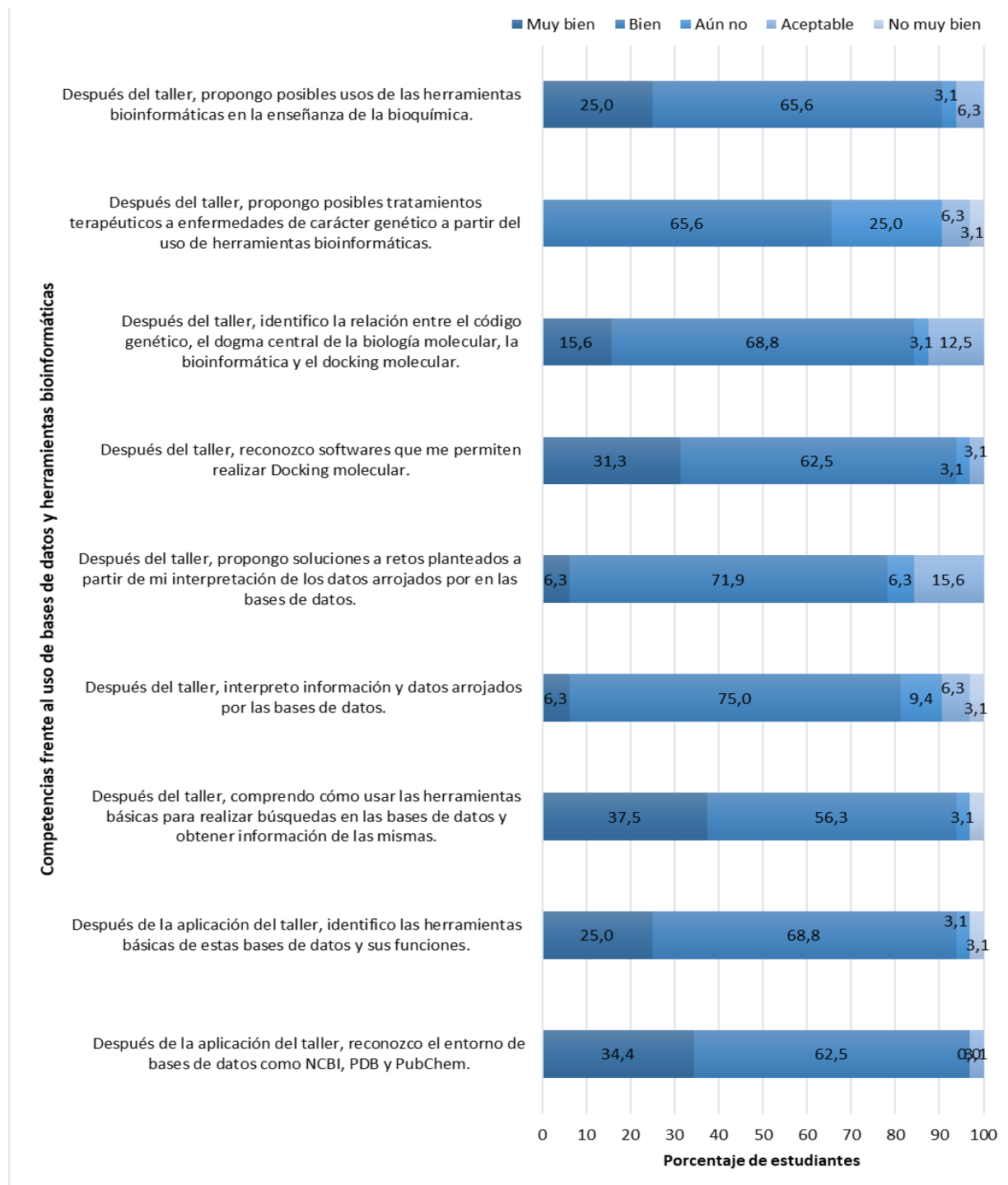
**-E12:** *Sí creo que se deberían aplicar en las aulas, sin embargo, hay muchos colegios que no cuentan con lo necesario para desarrollar y trabajar con estas herramientas.*

En la categoría 3 (con una respuesta), se encuentra la visión del “no rotundo” en la que se encuentra la respuesta del **E10** que considera que: “No, es muy avanzada y algo compleja, aunque si fuera para bachillerato de 11 podría aplicarse lo básico.” Que al final reconsidera que tendrían que realizarse adaptaciones pedagógico-didácticas para el nivel.

Por lo que se considera un impacto positivo que el 97% de los estudiantes considere la posibilidad de incluir a las herramientas bioinformáticas en sus prácticas docentes y que ellos sean quienes propongan sus potencialidades en las clases, incluso no sólo a nivel investigativo, puesto que en el taller no se mencionaron sus posibles usos como herramientas pedagógico-didácticas. Finalmente se realizó una prueba de Likert que, a manera de autoevaluación, permitió identificar el nivel que desde su perspectiva los docentes en formación adquirieron a lo largo del taller en cuanto a los criterios de dominio de las aplicaciones y bases de datos. -véase figura 4-. En esta ellos debían asociar cada criterio de las competencias a un nivel de logro determinado por una escala de Likert con 5 criterios: Muy bien, bien, Aún no, Aceptable, No muy bien

**Figura 41**

*Resultados de la prueba Likert para determinar el nivel de logro de cada uno de los criterios que componían a la competencia seleccionada*



Fuente: Elaboración propia

La prueba Likert permitió identificar la autoevaluación de cada uno de los docentes en formación puesto que se quería tener la perspectiva de si ellos habían notado un impacto en sus conocimientos sobre el dominio de las herramientas bioinformáticas o si no había sido tan claro, porque ellos por ejemplo habían trabajado en grupos y es muy posible que el trabajo se realizará en tareas distribuidas. Sin embargo, los resultados generales son bastante positivos, en vista que en 8 de los nueve criterios los criterios *Muy bien* y *Bien* son mayoritariamente seleccionados.

Solamente en el criterio: *“Después del taller, propongo posibles tratamientos terapéuticos a enfermedades de carácter genético a partir del uso de herramientas bioinformáticas”* que resultó en gran medida muy ambicioso no se manifestó un buen resultado, pues este es el único en el que *“Aún no”* corresponde al 25% lo que da cuenta, como se esperaba, que los estudiantes tuviesen dudas a la hora de proponer posibles tratamientos terapéuticos por lo que se presuponía que no se tuviese una respuesta favorable en este criterio. Sin embargo, la autoevaluación en cuanto a competencias como reconocimiento de entornos básicos, manejo de herramientas básicas y resolución de tareas tanto en las bases de datos como en los softwares seleccionados presenta una autoevaluación favorablemente positiva.



## Conclusiones

Considerando entonces la problemática y los objetivos de este proyecto de investigación, se concluye que:

El principal aporte de este trabajo es el cuestionamiento al plan curricular de la licenciatura en química en cuanto al establecimiento de competencias tecnológicas enfocadas en su uso pedagógico-didáctico. Puesto que, hay se encontró que no hay suficiente desarrollo en las competencias investigativas de orden tecnológico que se pueden desarrollar a lo largo de la carrera.

Además, se obtuvo un diseño apropiado del programa guía de actividades con enfoque ABI que favoreció en gran medida el desarrollo de la competencia “Saber utilizar programas informáticos específicos de su campo profesional” en vista que en cada uno de los retos propuestos fue desarrollado un criterio de evaluación que permitiese determinar hasta qué punto se había fortalecido la competencia. La afirmación anterior se sustenta en los resultados que fueron mayoritariamente positivos en los tres retos que se encargaron del desarrollo de dichos criterios. Lo que permite afirmar que la secuencia de actividades y su enfoque (ABI) fortalecen la competencia seleccionada. Anexo a esto, la actividad de contextualización usada fue desarrollada comprendiendo las implicaciones genéticas y el aprovechamiento de compuestos bioactivos en el tratamiento de la LMC todo mediado por herramientas bioinformáticas.

Frente al impacto de la intervención didáctica en el fortalecimiento de la competencia “saber utilizar programas especializados de su campo profesional”. Por medio del reto 4, ya que los docentes en formación fueron cuestionados en torno a las utilidades de las herramientas bioinformáticas en el aula y no sólo respondieron a la pregunta de si las utilizarían en colegios, sino que también diseñaron actividades que integraban a las herramientas bioinformáticas, vistas en la aplicación, de manera didáctica para la enseñanza de conceptos de bioquímica. Se puede postular entonces, que además de haber fortalecido la competencia seleccionada, la reflexión pedagógica realizada por los docentes corresponde a un paso inicial para un posible impacto futuro en su desarrollo profesional generando innovación en las aulas educativas y en la enseñanza de bioquímica.

Anexo a esto, la prueba de salida permitió identificar que también hubo un progreso conceptual en cuanto a las nociones de bioinformática y docking molecular, puesto que tanto los estudiantes que señalaron no tener idea de nada entorno a la bioinformática y sus aplicaciones como aquellos que sí, lograron hacer propuestas que al codificarse en Atlas ti permitieron identificar el nivel de relaciones de conceptos y la progresión de las definiciones de los estudiantes. En ese sentido, la aplicación de este trabajo de grado también cuenta con un impacto conceptual y contextual puesto que por medio del contexto de una enfermedad como la LMC y la búsqueda de posibles tratamientos para la misma se logró desarrollar una competencia con altas potencialidades en cuanto no sólo a lo investigativo sino también a lo pedagógico-didáctico y la innovación educativa.

Contemplando que se encontró por ejemplo, a nivel disciplinar, una alta potencialidad al alfa tocoferol al compararlo con medicamentos usados en su tratamiento. Por lo que, un impacto positivo de este trabajo es la investigación futura que se podría dar en cuanto a las potencialidades del alfa tocoferol como posible biocompuesto antioxidante que serviría para el tratamiento de enfermedades como la Leucemia Mieloides Crónica.

## Referencias

- Andryech. (2020, Abril 26). *¿Cómo seleccionar el mejor modelo del PDB para estudios de docking, dinámica o 3D QSAR?. [Video].* <https://www.youtube.com/watch?v=vyUo6YL7hLI>
- Angarita Sabogal, S., Berdugo Lombana, S. Y., & Moya Peralta, P. A. (2016). Competencias investigativas en docentes en formación inicial a partir del estudio de las propiedades anticancerígenas del Agraz.
- Ballón Paucara, Wendy Guadalupe, & Grados Torrez, Ricardo Enrique. (2019). Acomplamiento molecular: criterios prácticos para la selección de ligandos biológicamente activos e identificación de nuevos blancos terapéuticos. *Revista CON-CIENCIA*, 7(2), 55-72. Recuperado en 01 de octubre de 2023, de [http://www.scielo.org.bo/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S2310-02652019000200006&lng=es&tlng=es](http://www.scielo.org.bo/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S2310-02652019000200006&lng=es&tlng=es).
- Briñez Zambrano, Wilfido José (2015). El docente investigador: su aporte al desarrollo. *Revista Científica*, XXV(6), [fecha de Consulta 6 de Octubre de 2022]. ISSN: 0798-2259. Disponible en: <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=95944009001>
- Burbules, N. (2012). El aprendizaje ubicuo y el futuro de la enseñanza. *Encounters on education*, 13, 3-14.
- Calvo Álvarez, J. C. (2020). Estudio del efecto del D- $\alpha$ -tocoferol polietilenglicol 1000 succinato (TPGS) como potencial agente terapéutico en el tratamiento de la leucemia mieloide crónica.
- Colman, H. (2021, June 21). *La pandemia por COVID-19 cambió la industria de la educación — Observatorio / Instituto para el Futuro de la Educación*. Observatorio de Innovación Educativa. Retrieved October 11, 2022, Recuperado de: <https://observatorio.tec.mx/edu-bits-blog/la-pandemia-cambio-la-industria-de-la-educacion-para-siempre>
- Compartir, F. (2014). Tras la excelencia docente. *Bogotá: Editorial Puntoaparte*.
- Contreras, G. A. G., & Ospina, Y. L. (2008). Desarrollo de competencias científicas a través de una estrategia de enseñanza y aprendizaje por investigación. *Studiositas*, 3(3), 7-16. Recuperado de: <https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=3717381>
- Cruz Rodriguez, E. D. C. (2018). Importancia del manejo de competencias tecnológicas en las prácticas docentes de la Universidad Nacional Experimental de la Seguridad (UNES). *Revista Educación*, 43(1), 196–218. <https://doi.org/10.15517/revedu.v43i1.27120>
- Cuetos Revuelta, M. J., Grijalbo Fernández, L., Argüeso Vaca, E., Escamilla Gómez, V., & Ballesteros Gómez, C. (2020). Potencialidades de las TIC y su papel fomentando la creatividad: percepciones del profesorado. *RIED. Revista Iberoamericana de Educación a Distancia*.

- Duque, W. D. (2021). *Bioinformática : una herramienta didáctica para la enseñanza de la inhibición enzimática desde los estilos de aprendizaje.* Recuperado de: <http://hdl.handle.net/20.500.12209/17056>.
- Fandos, M. (2003). Formación basada en las Tecnologías de la Información y Comunicación: Análisis didáctico del proceso de enseñanza-aprendizaje. *Tarragona: Departament de Pedagogía. Resumen recuperado de <http://hdl.handle.net/10803/8909>.*
- Gomari, M. M., Rostami, N., Ghodrati, A., Hernandez, Y., Fadaie, M., Eslami, S. S., & Tarighi, P. (2021). Implementation of docking, molecular dynamics and free energy to investigate drug potency of novel BCR-ABL T315I inhibitors as an alternative to ponatinib. *Computational Toxicology, 20*, 100180.
- Gómez Daza, S. . (2021). Bioinformática como recurso educativo para enseñar variabilidad genética mediante la comparación de mapas de restricción. *REVISTA DE LA ASOCIACION COLOMBIANA DE CIENCIAS BIOLÓGICAS, 1*(33), 36–45. <https://doi.org/10.47499/revistaacsb.v1i33.231>
- Hanwell, M.D., Curtis, D.E., Lonie, D.C. et al. Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *J Cheminform 4, 17* (2012). <https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17>
- Hernández Navarro, M. I. ., Panunzio, A. P. ., Daher Nader, J. ., & Royero Moya, M. Ángel . (2019). Las competencias investigativas en la Educación Superior. *Yachana Revista Científica, 8*(3). <https://doi.org/10.1234/yach.v8i3.610>
- Ibarra, R. C., Ocegueda, A. T. S., Escobedo, R. M. V., & Gómez, L. E. G. (2020). La investigación educativa apoyada en TIC desde la perspectiva de los docentes de la UACyA-UAN. *Revista de Investigación en Tecnologías de la Información: RITI, 8*(16), 108-119.
- ISCIII. (2020, 07 30). *¿Qué es la bioinformática y qué aplicaciones tiene en biomedicina?* Instituto de Salud Carlos III. <https://www.isciii.es/InformacionCiudadanos/DivulgacionCulturaCientifica/DivulgacionISCIII/Paginas/Divulgacion/Bioinformatica.aspx#:~:text=%E2%80%8BLa%20bioinform%C3%A1tica%20permite%20investigar,la%20automatizaci%C3%B3n%20de%20tecnolog%C3%ADas%20diagn%C3%93sticos>
- Mendoza, O. W. (2012). *Las competencias investigativas del docente universitario como fundamento de la función pedagógica del tutor en el modelo E-Learning.* Recuperado de: <http://hdl.handle.net/20.500.12749/2907>
- Martínez-Vaz, B. M., (2014). Conceptos claves, laboratorios de investigación y bases de datos: estrategias para la enseñanza de Bioquímica en siglo XXI. *Química Viva, 13*(1),5-17.[fecha de

Consulta 17 de Octubre de 2022]. ISSN: . Recuperado de:  
<https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=86330863004>

Marrero Sánchez, O., & Pérez Zulueta, M. A. (2014, Febrero). COMPETENCIAS INVESTIGATIVAS EN LA EDUCACIÓN SUPERIOR. *RES NON VERBA*, 55-68. Recuperado de:  
<https://biblio.ecotec.edu.ec/revista/edicionespecial/COMPETENCIAS%20INVESTIGATIVAS%20EN%20LA.pdf>

MEN. (2016, 05 28). *Plan Nacional Decenal de Educación 2016-2026. El camino hacia la calidad y la equidad*. Ministerio de Educación Nacional. Recuperado de:  
[https://siteal.iiep.unesco.org/sites/default/files/sit\\_accion\\_files/siteal\\_colombia\\_0404.pdf](https://siteal.iiep.unesco.org/sites/default/files/sit_accion_files/siteal_colombia_0404.pdf)

MEN. (2022, mayo). *La formación docente en Colombia: Nota técnica*. Ministerio de Educación nacional. Recuperado de : [https://www.mineduccion.gov.co/1780/articles-363488\\_recurso\\_18.pdf](https://www.mineduccion.gov.co/1780/articles-363488_recurso_18.pdf)

Mendez, Irma Antonio (2015). Rúbrica para evaluar infografía. Slideshare. Tomada de:  
<https://es.slideshare.net/1224irma/rbrica-para-evaluar-infografa>

Moreno Olivos, Tiburcio. (2012). La evaluación de competencias en educación. *Sinéctica*, (39), 01-20. Recuperado en 02 de noviembre de 2022, de  
[http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1665-109X2012000200010&lng=es&tlng=es](http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1665-109X2012000200010&lng=es&tlng=es).

Moscoso, J. N. (2017). Los métodos mixtos en la investigación en educación: hacia un uso reflexivo. *Cadernos de pesquisa*, 47, 632-649. Recuperado de:  
<https://www.scielo.br/j/cp/a/CWZs4ZzGJj95D7fK6VCBFxy/?format=pdf&lang=es>

National Human Genome Research Institute. (2022, Agosto 23). *Bioinformática*. Glosario parlante de términos genómicos y genéticos. Recuperado de: <https://www.genome.gov/es/genetics-glossary/Bioinformatica>

Núñez, N. (2019). Enseñanza de la competencia investigativa: percepciones y evidencias de los estudiantes universitarios. *Revista Espacios*, 40(41), 26-42. Recuperado de:  
[https://www.scielo.sa.cr/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1409-42582019000100297#B3](https://www.scielo.sa.cr/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1409-42582019000100297#B3)

Olaya-Abril, A.y Cejas-Molina, M.(2018). Bioinformática como recurso educativo: Proyecto de ingeniería genética. EDMETIC, Revista de Educación Mediática y TIC, 7(1),174-doi: <https://doi.org/10.21071/edmetic.v7i1.10027>

Oviedo, Heidi Celina, & Campo-Arias, Adalberto. (2005). Aproximación al uso del coeficiente alfa de Cronbach. *Revista Colombiana de Psiquiatría*, 34(4), 572-580. Retrieved October 21, 2023, from [http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0034-74502005000400009&lng=en&tlng=es](http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0034-74502005000400009&lng=en&tlng=es).

- Pantoja-Chamorro, Ana L, Hurtado-Benavides, Andrés M, & Martínez-Correa, Hugo A. (2017). Evaluación del Rendimiento, Composición y Actividad Antioxidante de Aceite de Semillas de Mora (*Rubus glaucus*) Extraído con CO<sub>2</sub> Supercrítico. *Información tecnológica*, 28(1), 35-46. <https://dx.doi.org/10.4067/S0718-07642017000100005>
- Peñaherrera, M., Chiluzza, K. y Ortiz, A. (2014). Inclusión del Aprendizaje Basado en Investigación (ABI) como práctica pedagógica en el diseño de programas de postgrados en Ecuador. Elaboración de una propuesta. *Journal for Educators, Teachers and Trainers*, Vol. 5(2), pp. 204 – 220.
- Pérez Galindo, Carlos Andrés; Rodríguez Herrera, Jorge Alberto. (2008. )De la táctica didáctica a la práctica investigativa: experiencia desde la bioinformática *Revista Virtual Universidad Católica del Norte*, núm. 23, febrero-mayo, 2008, pp. 1-12 Recuperado de: <https://www.redalyc.org/pdf/1942/194220391005.pdf>
- Rocha, M. I. P. (2012). Fortalecimiento de las competencias investigativas en el contexto de la educación superior en Colombia. *Revista de investigaciones UNAD*, 11(1), 9-34.
- Rodríguez, Claudio & Ortega, Juan. (2014). Evaluación del sistema de aprendizaje basado en la investigación (SABI) en la unidad bioquímica del CICS UMA IPN. *Ra Ximhai*. 173-186. 10.35197/rx.10.03.e1.2014.12.bp. Recuperado de: [10.35197/rx.10.03.e1.2014.12.bp](https://doi.org/10.35197/rx.10.03.e1.2014.12.bp)
- Rodríguez Cepeda, R., & Cortés Parra, M. J. (2021). Sars CoV2, una experiencia de la bioquímica en contexto para la enseñanza de conceptos asociados a las proteínas. *Revista de Educación a Distancia (RED)*, 21(67). <https://doi.org/10.6018/red.465221>
- Sánchez-Martín, M., & Sánchez García, I. (2003). Inhibidores de BCR-ABL como un abordaje molecular de la leucemia mieloide crónica.
- Saborío, N. C. (2015). ¿Por qué es importante que el personal docente investigue? Reflexión a partir de resultados de una experiencia de investigación etnográfica. *Actualidades Investigativas en Educación*, 15(3).
- Servicio de Innovación Educativa de la UPM (Julio 2020). Aprendizaje basado en la investigación. Madrid: Universidad Politécnica de Madrid. Disponible en: [https://innovacioneducativa.upm.es/guias\\_pdi](https://innovacioneducativa.upm.es/guias_pdi)
- UPN & Licenciatura en Química (2018). *Presentación del programa de Licenciatura en Química*. Licenciatura en Química. Recuperado de: <http://licenciaturaenquimica.upn.edu.co/nosotros/>
- UPN & Licenciatura en Química (2023). Perfil del Aspirante y del Egresado – leq. Licenciatura en Química. Recuperado de: <http://licenciaturaenquimica.upn.edu.co/perfil-del-aspirante-y-del-egresado/>
- Varguillas, C., (2006). El uso de atlas.Ti y la creatividad del investigador en el análisis cualitativo de contenido upel. *Instituto pedagógico rural el mácaro*. Laurus, 12(Ext), 73-8

## Anexos

### Anexo 1. Prueba de entrada

#### Prueba de entrada



- Si su respuesta a la anterior pregunta fue afirmativa, describa los conocimientos que tiene respecto a la bioinformática. De lo contrario, omita la pregunta.
- ¿Qué programas -software o en línea- ha utilizado en sus espacios académicos? Escriba los nombres de los que ha utilizado, o escriba "Ninguno", en el caso de no haber utilizado programas en sus clases. Ejemplos de programas: Avogadro, Chimera, Gavedit, ORCA...
- ¿Ha empleado herramientas bioinformáticas para el desarrollo de análisis en tópicos relacionados con genética, fármacos o enfermedades?
- Entiéndase a herramientas como uso de bases de datos (PDB, PubChem, NCBI) o PyRx, AutoDock, Vina Wizard, Open Babel.
- Si su respuesta anterior fue "Sí" mencione los programas y su funcionalidad.
- ¿Tiene conocimiento sobre lo que es el "Docking molecular"

### Anexo 2. Guía Leucemia Mieloide Crónica: Origen genético de la enfermedad.

# LEUCEMIA MIELOIDE CRÓNICA: ORIGEN GENÉTICO DE LA ENFERMEDAD



## BCR-ABL y Leucemia Mieloide Crónica (LMC)<sup>1</sup>

En 1959 Peter Nowell y David Hungerford identificaron la primera alteración cromosómica asociada a una enfermedad maligna, la leucemia mieloide crónica (LMC). Las metafases de estos pacientes contaban de manera recurrente con un cromosoma más pequeño de lo normal al que se llamó cromosoma Filadelfia. Doce años después, Janet D. Rowley demostró que este marcador cromosómico era consecuencia de la translocación recíproca entre los brazos largos de los cromosomas 9 y 22, y no de la pérdida de material genético de este último, como hasta entonces se creía. Pasaría una década hasta identificar los genes implicados en esta translocación y clonar el mRNA (ARN mensajero) de fusión. Estudios posteriores pusieron en evidencia que la fusión BCR-ABL, a la que nos referimos, era esencial para la **génesis** de la LMC. Aunque en un principio la presencia del cromosoma Filadelfia estaba asociada a la LMC, se encontró este mismo marcador en algunos linfoblastos de pacientes afectados de leucemia aguda linfoblástica (LAL), generalmente pacientes adultos; sin embargo, a diferencia de lo que sucede en la LMC, el punto de ruptura en el gen BCR de estos pacientes era diferente y sucedía en el primer intrón. Por lo tanto, la misma anomalía citogenética produce dos **oncogenes** diferentes, BCR-ABL p190 y BCR-ABL p210, que se asocian específicamente con LMC y LAL, respectivamente.

El gen ABL implicado en esta translocación codifica una proteína con actividad tirosinquinasa y las fusiones génicas de BCR con ABL en la LMC o en la LAL codifican para una **proteína quimérica** con actividad tirosinquinasa constitutiva. Esta actividad es crucial y se considera indispensable en el mecanismo de transformación celular al que induce esta oncoproteína. La infección de células de médula ósea de ratón con retrovirus que codifican la fusión BCR-ABL es suficiente para causar un **síndrome mieloproliferativo** que rememora a la LMC del humano. El mismo fenotipo se obtiene al generar ratones transgénicos que expresan esta proteína quimérica BCR-ABL p210 en el compartimento **stem** hematopoyético (JPL, MSM, and I. Sánchez-García, datos sin publicar). Estos datos identifican a esta oncoproteína de fusión como una diana terapéutica muy importante para el tratamiento específico de la LMC.

<sup>2</sup>Las tasas de respuesta a las diferentes aproximaciones terapéuticas disponibles actualmente (quimioterapia, radioterapia, trasplante de células madre) se han visto reducidas, entre un 15-20% de los pacientes presenta resistencia o intolerancia a este tipo de tratamientos, en especial para los tipos más agresivos o resistentes de LMC. Son variadas las características que poseen las células cancerosas que les permiten mantener el fenotipo maligno, un ejemplo es la evasión de los mecanismos de muerte celular regulada (apoptosis) por diferentes estímulos que pueden inducir apoptosis en las células cancerosas, como cambios en el metabolismo redox; por esto, la regulación del estrés oxidativo (EO) surge como un mecanismo interesante para el tratamiento de la LMC.

El EO es el desbalance entre la alta producción de especies reactivas de oxígeno (EROs) provenientes del metabolismo celular y los mecanismos moleculares antioxidantes diseñados para degradar los EROs. Este fenómeno permitiría que, mediante el uso de moléculas prooxidantes capaces de aumentar las EROs, se estimulen las vías de señalización encaminadas a la inducción de apoptosis, conduciendo a la muerte de las células cancerosas. El desarrollo de nuevos medicamentos contra el cáncer como alternativas terapéuticas que subsanen la resistencia e intolerancia a los tratamientos convencionales requiere de una gran inversión de tiempo y presenta altos costos para la industria, en la cual solo 1 de cada 250 moléculas probadas es capaz de llegar a ensayos clínicos. El reposicionamiento se define como el proceso de encontrar nuevos usos fuera de la indicación médica original para fármacos existentes; esta estrategia se presenta como una excelente herramienta para ahorrar tiempo y abaratar costos.

Por otro lado, el TPGS (D-  $\alpha$ -tocoferol polietilenglicol 1000 succinato) es una molécula anfipática, derivada de la vitamina E, que ha sido ampliamente estudiada y utilizada para el nanoencapsulamiento de principios activos, aumentando su biodisponibilidad y mejorando la solubilidad de algunos compuestos lipofílicos, esta molécula ha mostrado en la última década potencial antitumoral. Estos resultados sugieren que TPGS es una molécula promisorio para el tratamiento de LMC en pacientes que presentan resistencia o intolerancia a los inhibidores de tirosina quinasa (ITQ).

<sup>1</sup>Fragmento extraído de: Sánchez-Martín, M., & Sánchez García, I. (2003). Inhibidores de BCR-ABL como un abordaje molecular de la leucemia mieloide crónica.

<sup>2</sup>Fragmento extraído de: Calvo Álvarez, J. C. (2020). Estudio del efecto del D- $\alpha$ -tocoferol polietilenglicol 1000 succinato (TPGS) como potencial agente terapéutico en el tratamiento de la leucemia mieloide crónica.

## Vocabulario

- **Génesis:**<sup>2</sup> Origen o principio de una cosa. Serie encadenada de hechos y de causas que conducen a un resultado.
- **Oncogenes:**<sup>3</sup> Genes que promueven el crecimiento y la división celular.
- **Proteína quimérica o proteína de fusión:**<sup>4</sup> Proteína elaborada con un gen de fusión, que se crea al unir partes de dos genes diferentes. Los genes de fusión se pueden presentar de forma natural en el cuerpo mediante la transferencia de ADN entre los cromosomas.
- **Síndrome mieloproliferativo:**<sup>5</sup> Las neoplasias mieloproliferativas son un grupo de enfermedades por las que la médula ósea elabora demasiados glóbulos rojos, glóbulos blancos o plaquetas.

## Actividad 1.

Realicen en grupos de 4 personas una infografía a partir de la lectura presentada, pueden utilizar plataformas como [Canva](https://www.canva.com). Se sugiere una metodología de construcción de la infografía. La infografía será expuesta por uno de los participantes del grupo en 5 minutos.



Imagen tomada de: <https://blog.hubspot.es/marketing/hacer-infografia-desde-cero>





## Anexo 7. Criterios de selección de proteína

### ¿CÓMO SELECCIONAR LA MEJOR PROTEÍNA PARA EL DOCKING MOLECULAR?

1. La proteína de elección tiene ligandos identificados dentro de su estructura.

Sí  No

\*En el caso de tenerla evalúe el numeral 2.

2. ¿Cuál es la calidad del ligando?



3. ¿Cuál fue el método de cristalización de la proteína?



Espectroscopia de RMN

Difracción de rayos X

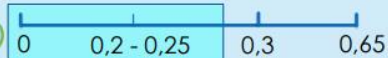
4. ¿Cuál es la resolución en Å de la proteína?



3Å

Cuanto menor sea el valor en Angstroms mayor será la resolución. El ideal es que los valores no se acerquen a 3 Å.

5. ¿Cuál es el valor de R-Libre?



## Anexo 9. Reto 1. Selección de proteínas para Docking Molecular-Leucemia Mieloide Crónica

### Reto 1. Selección de proteínas para Docking molecular: Leucemia Mieloide

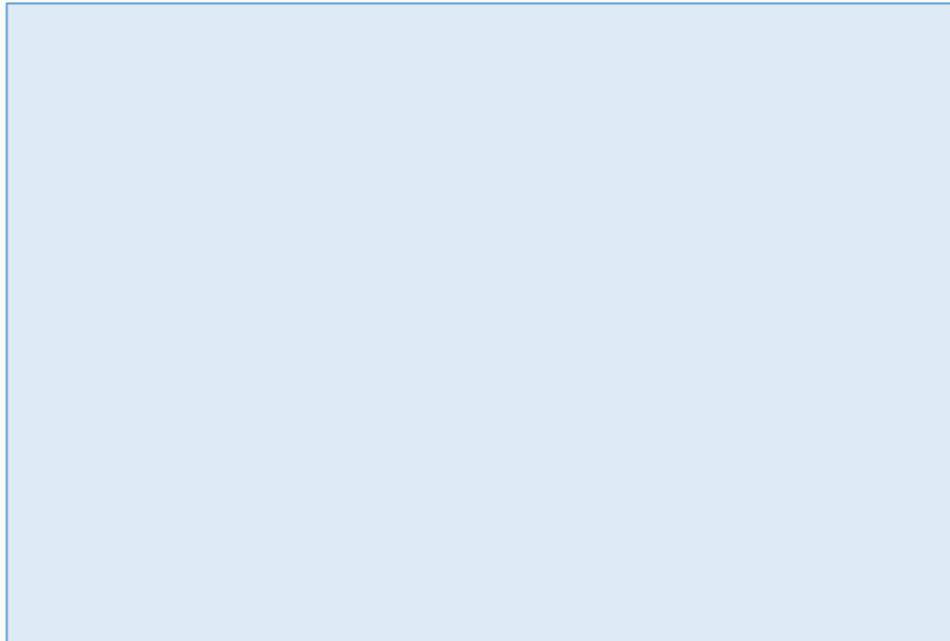


Integrantes:

En los grupos en los que realizaron la infografía y teniendo en cuenta los criterios de selección de las proteínas observados en el video para la base de datos Protein Data Bank (PDB). Determinen por grupos: ¿cuál de las siguientes estructuras de la proteína BCR-ABL tiene mejor calidad para poder realizar docking molecular?

- 3OY3: <https://www.rcsb.org/structure/3oy3>
- 3IK3: <https://www.rcsb.org/structure/3IK3>
- 1K1F: <https://www.rcsb.org/structure/1K1f>
- 4AGW: <https://www.rcsb.org/structure/4AGW>

1. Una vez hayan seleccionado la proteína de mejor calidad coloquen un pantallazo en esta sección:



**Justifiquen su respuesta con base en los criterios expuestos:**

## Anexo 10. Guía de corrección del reto 1

**Corrección reto 1. Selección de proteínas**

**Docking molecular**

### 30Y3

**Experimental Data Snapshot**  
Method: X-RAY DIFFRACTION  
Resolution: 1.95 Å  
R-Value Free: 0.266  
R-Value Work: 0.220

**wwPDB Validation** 3D Report Full Report

Metric	Percentile Ranks	Value
Rtfree		0.252
Clashscore		9
Ramachandran outliers		1.1%
Sidechain outliers		3.6%
RSRZ outliers		6.2%

**Ligand Structure Quality Assessment**

Worse 0 1 Better  
Ligand structure goodness of fit to experimental data

### 3IK3

**Experimental Data Snapshot**  
Method: X-RAY DIFFRACTION  
Resolution: 1.90 Å  
R-Value Free: 0.258  
R-Value Work: 0.216

**wwPDB Validation** 3D Report Full Report

Metric	Percentile Ranks	Value
Rtfree		0.250
Clashscore		9
Ramachandran outliers		0.7%
Sidechain outliers		3.4%
RSRZ outliers		11.7%

**Ligand Structure Quality Assessment**

Worse 0 1 Better  
Ligand structure goodness of fit to experimental data

### 1K1F

**Experimental Data Snapshot**  
Method: X-RAY DIFFRACTION  
Resolution: 2.20 Å  
R-Value Free: 0.295  
R-Value Work: 0.262  
R-Value Observed: 0.262

**wwPDB Validation** 3D Report Full Report

Metric	Percentile Ranks	Value
Clashscore		48
Ramachandran outliers		4.1%
Sidechain outliers		5.0%

**Ligand Structure Quality Assessment**

Worse 0 1 Better  
Ligand structure goodness of fit to experimental data

### 4AGW

**Experimental Data Snapshot**  
Method: X-RAY DIFFRACTION  
Resolution: 2.60 Å  
R-Value Free: 0.271  
R-Value Work: 0.226  
R-Value Observed: 0.230

**wwPDB Validation** 3D Report Full Report

Metric	Percentile Ranks	Value
Rtfree		0.268
Clashscore		46
Ramachandran outliers		0.2%
Sidechain outliers		0.9%
RSRZ outliers		3.3%

## Anexo 11: Guía de refinamiento de ligandos y proteínas.

[Refinamiento de moléculas.pdf](#)

## Reto 2. Descarga de proteínas y optimización de geometría. LMC



Teniendo en cuenta el documento “Refinamiento de moléculas”:

1. Descarguen la proteína que seleccionaron en el reto 1 para el tratamiento de la Leucemia Mieloide Crónica en su computador y súbanlo a la plataforma Moodle en la tarea “Reto 2”.
2. Descarguen los siguientes compuestos desde PubChem:
  - PBA2 (Compound CID: 136263955)
  - CD-200 (Compound CID: 4715254)
  - JNJ-26854165 (Compound CID: 11609586)
  - Tocoferol (Compound CID: 20353)
  - Ponatinib (Compound CID: 24826799)

Indaguen más sobre estos compuestos en PubChem y en el siguiente recuadro señalen posibles ventajas de estos compuestos en el tratamiento de la enfermedad:

**-PBA2:**

**-JNJ-26854165:**

**- Tocoferol:**

**- Ponatinib:**

**¿Cuál sería más efectivo en el tratamiento de la LMC?**

3. Realicen la optimización de la geometría de cada uno de los compuestos mencionados en el punto 2 utilizando Avogadro como se muestra en el documento “Refinamiento de moléculas”. Exporten sus compuestos en formato “[mol2](#)” y cárguenlos en la plataforma en la tarea junto con este archivo solucionado.
4. Revisen el vídeo sobre: ¿Cómo limpiar una proteína en UCFS Chimera? El enlace se encuentra en el documento: “Refinamiento de moléculas” o en la plataforma Moodle.



Anexo 13: Link para acceder al video "¿Cómo limpiar una proteína en UCSF Chimera para realizar docking molecular?"

[https://www.youtube.com/watch?v=wxntlV5ovxU&list=PLKL\\_yYixZcZon0RZUe2E71b82a\\_ARXPld&index=3](https://www.youtube.com/watch?v=wxntlV5ovxU&list=PLKL_yYixZcZon0RZUe2E71b82a_ARXPld&index=3)

Anexo 14. Guía de docking molecular

[Docking molecular.pdf](#)

Anexo 15: Guía de reto 3



## Reto 3. Docking molecular

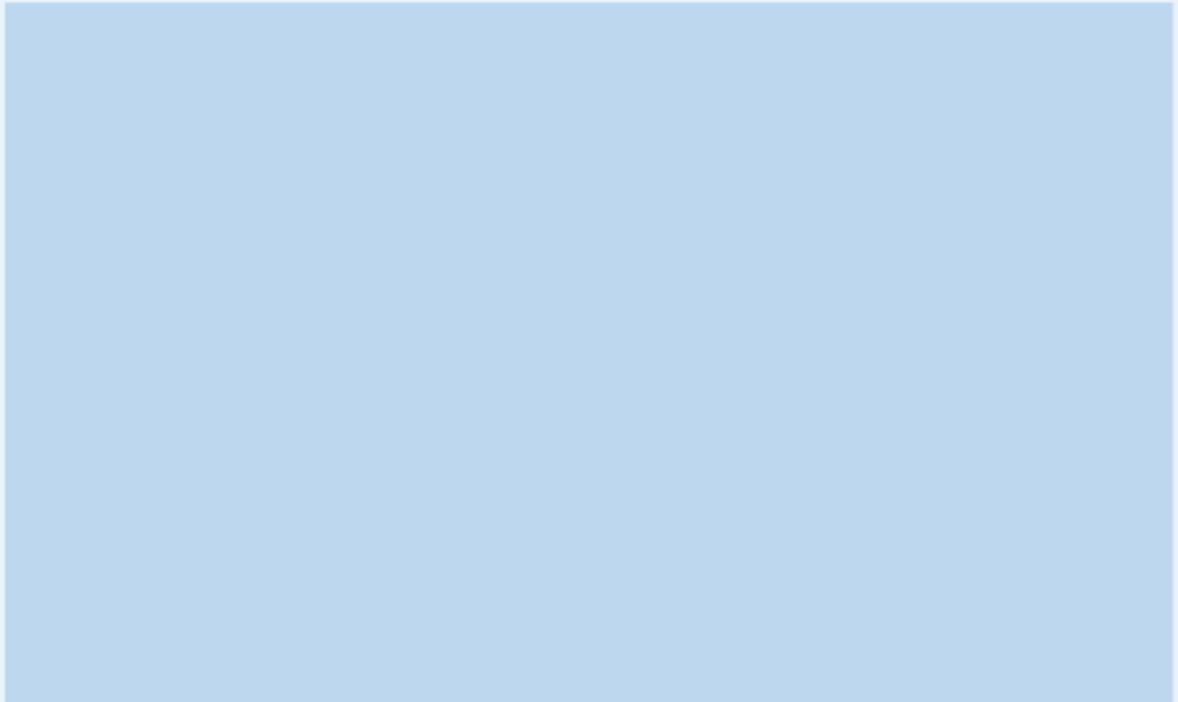
Teniendo en cuenta la proteína seleccionada en el reto 2:

1. Coloquen un pantallazo de las cadenas de su proteína e identifiquen la mejor cadena para limpiar a su proteína en Chimera UCSF.

**Escriba la letra de la cadena seleccionada:**

2. Coloque un pantallazo de su proteína limpia:

3. Coloquen un pantallazo de los resultados de su docking molecular:



¿Cuál fue el ligando de menor energía?

¿Coincide con su propuesta de efectividad del reto 2?



## Anexo 16. Prueba de salida

### Prueba de salida



1. Defina con sus propias palabras lo que entiende por bioinformática:
2. Defina con sus propias palabras lo que entiende por docking molecular:
3. Realice un ejercicio autoevaluativo de sus competencias frente al uso de bases de datos (PDB, PubChem y NCBI) y programas como (Avogadro, Chimera y PyRx). Tenga en cuenta que debe realizar el ejercicio en retrospectiva para determinar el impacto de esta aplicación considerando sus competencias antes de la aplicación de este taller y después del mismo.

En la columna del lado izquierdo encontrará la competencia respectiva y en la fila superior el nivel de logro que considera obtuvo después de la aplicación de este taller.

4. Desde su punto de vista, ¿cuál es la herramienta que más podría utilizar a partir de ahora?
5. Entiéndase herramienta como base de datos o software.
6. ¿Cómo considera que se puede incorporar la bioinformática en las aulas? ¿Cree que es una herramienta que se puede llevar a colegios?



