



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: **Python para Químicos**

Clave:	Semestre:	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos:
Carácter: Optativa de elección		Horas por semana	Total horas/ semana
Tipo: Curso		Teoría: 3	Práctica: 0
Modalidad: Teórica		Duración del programa: semanas	

Actividad académica con seriación antecedente: No aplica

Objetivo general:

1. Aprender las aplicaciones de la programación en Python a problemas de interés químico más allá de la química teórica

Objetivos específicos:

- Manejar el lenguaje de programación Python
- Resolver problemas químicos con Python
- Conocer las aplicaciones de la inteligencia artificial en química

Índice temático

Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Introducción a Python	6	0
2	Análisis de datos	6	0
3	Machine Learning y Quimioinformática	15	0
4	Modelado Molecular	3	0
10			
Total de horas teóricas:		30	
Total de horas prácticas:		0	
Suma total de horas:		30	

Bibliografía básica actualizada:

“Python for Chemists” Kiyoto Aramis Tanemura, Diego Sierra-Costa, Kenneth M. Merz Jr. (2022) ACS Publications

“Machine Learning for Chemistry: Basics and Applications” Yun-Fei Shi, Zheng-Xin Yang, Sicong Ma, Pei-Lin Kang, Cheng Shang, P. Hu, Zhi-Pan Liu *Engineering* (2023) ISSN 2095-8099

“Best Practices in Machine Learning for Chemistry” *Nature Chemistry* (2021) 13, 505-508.

“Machine learning, artificial intelligence, and chemistry: How smart algorithms are reshaping simulation and the laboratory” D. Kuntz, A. K. Wilson *Pure and Applied Chemistry* (2022) 94, (8): 1019-1054.

“An Introduction to Chemoinformatics” Andrew R. Leach, Valerie J. Gillet (2007) Springer ed.

Bibliografía complementaria: www.learnpythonthehardway.org

Sugerencias didácticas:

Exposición oral	(X)
Exposición audiovisual	(X)
Ejercicios dentro de clase	(X)
Ejercicios fuera del aula	(X)
Seminarios	()
Lecturas obligatorias	(X)
Trabajo de investigación	(X)
Prácticas de taller o laboratorio	()
Prácticas de campo	()
Otras:	()

Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:

Exámenes parciales	()
Examen final escrito	()
Trabajos y tareas fuera del aula	(X)
Exposición de seminarios por los alumnos	()
Participación en clase	()
Asistencia	()
Seminario	(X)
Otras:	(X)