Guía Docente:

METODOLOGÍAS AVANZADAS EN QUÍMICA ANALÍTICA

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
CURSO 2017-2018

I.- IDENTIFICACIÓN

NOMBRE DE LA ASIGNATURA: Metodologías Avanzadas en Química Analítica

NÚMERO DE CRÉDITOS: 6
CARÁCTER: Optativa
MATERIA: Química Analítica Avanzada
MÓDULO: Avanzado
TITULACIÓN: Grado en Química
SEMESTRE/CUATRIMESTRE: Segundo semestre (cuarto curso)
DEPARTAMENTO: Química Analítica

PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:

Grupo A		
Teoría **Seminario** **Tutoría**	**Profesor:** **Departamento:** **Despacho:** **e-mail:**	FERNANDO NAVARRO VILLOSLADA Química Analítica QA-402 fenavi@ucm.es
Teoría **Seminario** **Tutoría**	**Profesora:** **Departamento:** **Despacho:** **e-mail:**	ESTEFANIA MORENO GORDALIZA Química Analítica QA-402 estefania.moreno@quim.ucm.es
Grupo B		
Teoría **Seminario** **Tutoría**	**Profesora:** **Departamento:** **Despacho:** **e-mail:**	MARÍA EUGENIA DE LEÓN GONZÁLEZ Química Analítica QA-319-A leongon@ucm.es
Teoría **Seminario** **Tutoría**	**Profesora:** **Departamento:** **Despacho:** **e-mail:**	ARACELI GONZÁLEZ CORTES Química Analítica QA-322-D aracelig@ucm.es

II.- OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

Estudiar y aplicar metodologías avanzadas en el campo de la Química Analítica relacionadas con la optimización y diseño experimental, el análisis de datos, la hibridación instrumental, la automatización y miniaturización, y los aspectos más relevantes de los sensores químicos y bioquímicos y de la Química Bioanalítica.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Proporcionar una base de conocimientos sobre metodologías avanzadas del análisis químico.
- Conocer y aplicar los fundamentos de la quimiometría en optimización y diseño experimental.

- Conocer y aplicar los fundamentos de la quimiometría en calibración multicomponente y en procesado de señales.
- Conocer y utilizar los principios generales de la hibridación instrumental.
- Conocer el fundamento y las aplicaciones de las principales técnicas automáticas de análisis.
- Conocer el fundamento y las aplicaciones de la miniaturización en procesos de análisis.
- Conocer el fundamento de los principales sensores químicos y bioquímicos.
- Conocer el fundamento de la Química Bioanalítica.

III.- CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

■ CONOCIMIENTOS PREVIOS:

■ RECOMENDACIONES:

Se recomienda haber superado las asignaturas *Química Analítica I, Química Analítica II* y *Química Analítica III* de la materia obligatoria Química Analítica del Módulo Fundamental.

IV.- CONTENIDOS

■ BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS:

Contenidos teóricos:

Optimización y diseño experimental. Análisis de datos. Hibridación instrumental: acoplamientos de técnicas cromatográficas y electroforéticas con detección espectroscópica o por espectrometría de masas. Automatización y miniaturización de procesos analíticos. Introducción a los sensores químicos y bioquímicos. Introducción a la Química Bionalítica: inmunosensores; análisis clínicos.

■ PROGRAMA:

Teórico

Tema 1: Optimización y diseño experimental

- Fundamentos.
- Tipos de diseños: Diseños simultáneos y secuenciales.

Tema 2: Métodos multivariantes

- Multidimensionalidad de los datos. Preprocesado de datos.
- Métodos no supervisados.
- Calibración multivariante.

Tema 3: Métodos acoplados

- Introducción.
- Espectrometría de Masas: acoplamientos a ICP, cromatografía de gases y cromatografía líquida.
- Técnicas cromatográficas multidimensionales: Acoplamientos de cromatografía de gases a cromatografía de gases, acoplamientos de cromatografía de líquidos a cromatografía de gases y cromatografía líquida.

Tema 4: Automatización y miniaturización

- Automatización en un laboratorio de análisis: definiciones y conceptos.
- Automatización de las diferentes etapas de un proceso analítico.
- Analizadores discontinuos, continuos y robotizados.
- Análisis por inyección en flujo.
- Miniaturización.

Tema 5: Química Bioanalítica

- Conceptos generales.
- Análisis enzimático.
- Introducción al inmunoensayo.
- Introducción al análisis de ADN.
- Aplicaciones escogidas al análisis clínico y al análisis forense.

Tema 6: Sensores y biosensores

- Principios básicos.
- Elementos de transducción y de reconocimiento.
- Introducción a los biosensores químicos.

Prácticas

Los estudiantes realizarán un total de tres prácticas divididas en tres sesiones de 3 horas. Se incluirán aspectos prácticos de diseño experimental, calibración multicomponente, análisis de componentes principales y aplicación de la automatización en el control de parámetros de interés.

- *Práctica 1*: Control de calidad del aire mediante análisis multivariante de los datos de la red de calidad del aire de la Comunidad de Madrid.
- *Práctica 2*: Determinación simultánea de tres analitos en una muestra problema mediante análisis multicomponente y espectrofotometría ultravioleta aplicando un diseño experimental de mezclas.
- *Práctica 3*: Determinación simultánea de los isómeros L- y D- del ácido láctico en muestras de vino empleando un sistema de inyección en flujo y un biosensor amperométrico enzimático.

V.- COMPETENCIAS

GENERALES:

- **CG2-MAQA1:** Valorar la importancia de la Química Analítica y su impacto en la sociedad industrial y tecnológica.
- **CG3-MAQA1:** Demostrar una base de conocimientos y habilidades con las que pueda continuar sus estudios en áreas especializadas de Química Analítica o en áreas multidisciplinares.
- **CG4-MAQA1:** Plasmar conocimientos avanzados de Química Analítica en el lenguaje científico, universal, entendido y compartido interdisciplinarmente.
- **CG7-MAQA1:** Aplicar conocimientos teóricos y prácticos a la solución de problemas en Química Analítica y seleccionar el método más adecuado para resolverlos.
- **CG8-MAQA1:** Valorar investigaciones y estudios detallados en el campo de la Química Analítica.
- **CG13-MAQA1:** Desarrollar buenas prácticas científicas de medida y experimentación en Química Analítica.

ESPECÍFICAS:

- **CE6-MAQA1:** Reconocer la potencialidad de la hibridación instrumental para la resolución de problemas analíticos complejos.
- **CE6-MAQA2:** Reconocer la importancia de la automatización y de la miniaturización desde el punto de vista de la simplificación y calidad.
- **CE6**-MAQA3: Reconocer la utilidad de sensores y biosensores, en particular para sus aplicaciones en el campo de la Química Analítica.
- **CE7-MAQA3:** Interpretar y analizar los datos procedentes de sistemas de análisis químicos tanto simples como complejos.

TRANSVERSALES:

- **CT1-MA1:** Elaborar y escribir informes analíticos de carácter científico y técnico.
- **CT2-MA1:** Trabajar en equipo.
- **CT3-MA1:** Aprender a tomar decisiones ante un problema real práctico.
- **CT4-MA1:** Seleccionar el método más adecuado para resolver un problema analítico planteado.
- **CT5-MA1:** Consultar, utilizar y analizar cualquier fuente bibliográfica.
- **CT5-MA2:** Manejar bibliografía y bases de datos especializadas, y de recursos accesibles a través de Internet.
- **CT7-MA3:** Usar programas informáticos que sirvan, en el mundo de la Química, para calcular, diseñar, simular, aproximar y predecir.
- **CT8-MA1:** Comunicarse en español utilizando los medios audiovisuales más habituales.
- **CT11-MA1:** Desarrollar trabajo autónomo.
- **CT12-MA1:** Desarrollar sensibilidad hacia temas medioambientales y preservación del medioambiente.

VI. – RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

Una vez superada esta asignatura, el alumno deberá ser capaz de:

Teoría

- Aplicar los fundamentos del diseño experimental- Identificar los tipos de diseños.
- Planificar experimentos.
- Diferenciar entre calibración univariante y multivariante.
- Describir los tipos de calibración multivariante.
- Definir análisis multicomponente.
- Clasificar los métodos de análisis multicomponente.
- Aplicar análisis multicomponente a sistemas complejos.
- Explicar la necesidad de utilizar técnicas acopladas en análisis químico.
- Clasificar los diferentes métodos acoplados.
- Comparar los diferentes acoplamientos utilizados en análisis.
- Definir los diferentes términos asociados a la automatización.
- Describir cómo se automatizan las diferentes etapas del proceso analítico.
- Clasificar los diferentes analizadores.
- Planificar sistemas de análisis por inyección en flujo, tanto automatizados como no automatizados.
- Describir los principios básicos de la miniaturización.
- Describir los principios básicos de análisis enzimático.
- Describir los principios básicos del inmunoensayo.
- Describir los principios básicos del análisis de ADN.
- Describir los principios básicos de los sensores.
- Diferenciar los componentes básicos de un biosensor: elementos de transducción y reconocimiento.
- Diferenciar los tipos de inmovilización básicos sobre distintos soportes.

Prácticas

- Utilizar programas informáticos para el diseño experimental y el análisis multicomponente.
- Analizar mezclas utilizando herramientas de diseño experimental y calibración multicomponente.
- Construir un sistema de análisis por inyección en flujo.
- Manejar un analizador automatizado.

VII. – HORAS DE TRABAJO Y DISTRIBUCIÓN POR ACTIVIDAD

Actividad	Presencial (horas)	Trabajo autónomo (horas)	Créditos
Clases teóricas	30,5	58,5	3,64
Seminarios	5,5	9,5	0,6
Tutorías/Trabajos dirigidos	4	6	0,4
Prácticas	9	7	0,56
Preparación de trabajos y exámenes	9	11	0,8
Total	**58**	**92**	**6**

VIII.- METODOLOGÍA

Los contenidos de la asignatura se presentan a los alumnos en **clases presenciales**, de cuatro tipos:

(a) C**lases de teoría,** en las que se dará a conocer al alumno el contenido de la asignatura. Al comienzo de cada tema se expondrán claramente los objetivos principales del tema en estudio. Al final del tema se plantearán cuestiones que permitirán interrelacionar los conocimientos ya adquiridos. Para facilitar la labor de seguimiento por parte del alumno de las clases presenciales se le proporcionará parte del material docente utilizado por el profesor, bien en fotocopia o en el Campus Virtual. La explicación de cada uno de los temas se hará utilizando la pizarra y diversos medios audiovisuales.

(b) **Clases de seminarios,** en las que se explicarán problemas numéricos en donde se apliquen los temas desarrollados en las clases de teoría y se fomentará la participación de los estudiantes, suministrándole previamente una relación de problemas/ejercicios.

(c) **Prácticas**, en los que se realizarán experimentos de laboratorio para desarrollar aspectos relacionados con el diseño experimental, el análisis multicomponente, la automatización y la utilización de biosensores.

(d) **Tutorías** con grupos reducidos, en las que se discutirán los problemas y las cuestiones propuestos por el profesor relacionadas con el temario de la asignatura, así como casos prácticos concretos.

En **actividades dirigidas,** los alumnos deberán presentar problemas o cuestiones propuestos por el profesor y una serie de controles sobre distintos aspectos tratados en la asignatura.

Se utilizará el **Campus Virtual** para permitir una comunicación fluida entre profesores y alumnos y como instrumento básico para poner a disposición de los alumnos el material que los profesores consideren necesario.

IX.- BIBLIOGRAFÍA

BÁSICA

- Kellner, R.; Mermet, J.M.; Otto, M., Varcálcel, M. y Widmer, H. M. "*Analytical Chemistry: A Modern Approach to Analytical Science*", 2ª ed., Wiley-VCH, 2004.

COMPLEMENTARIA

- D.A. Skoog.; F.J. Holler y S.R. Crouch "*Principios de Análisis Instrumental*", 6ª ed., Cengage Learning, 2008.
- L.M. Polo Díez "*Fundamentos de Cromatografía*", Dextra, 2015.
- M. Valcárcel, M.S. Cárdenas "*Automatización y miniaturización en Química Analítica*", Springer, 2000.
- S.R. Mikkelsen, E. Cortón "*Bionalytical Chemistry*", John Wiley & Sons, 2004.

X.- EVALUACIÓN

La evaluación del alumno se realizará a través de las actividades presenciales y no presenciales en las que participe. La calificación de la asignatura se realizará entre 0 y 10 puntos. Para aprobar la asignatura será necesario obtener 5 puntos.

La asistencia a las clases presenciales (teoría, seminarios, prácticas y tutorías) es obligatoria. Para poder realizar el examen final de la convocatoria de junio será necesario que el alumno haya participado al menos en el 70% de las actividades presenciales.

Las calificaciones de las actividades previstas para la evaluación de la asignatura (exámenes parciales, laboratorios, tutorías, entrega de problemas,…) se comunicarán a los estudiantes con la antelación suficiente antes de la realización del examen final, para que puedan planificar adecuadamente el estudio de ésta u otras asignaturas.

En todo caso, se respetará el plazo mínimo de siete días entre la publicación de las calificaciones y la fecha del examen final de la asignatura.

EXÁMENES ESCRITOS DE TEORÍA 65%

Se realizará un examen final en junio.

En el examen se propondrán problemas y cuestiones teóricas relacionadas con el temario de la asignatura. En cada examen figurarán las puntuaciones máximas que se otorgan a cada cuestión y a cada problema.

Para poder acceder a la calificación global de la asignatura será necesario obtener al menos 4,5 puntos en la nota final del examen.

Competencias evaluadas:

CG2, CG3, CG4, CG7, CG13
CE6-MAQA1, CE6-MAQA2, CE6-MAQA3, CE7-MAQA3
CT3, CT7

TRABAJO PERSONAL Y ACTIVIDADES DIRIGIDAS 30%

Se considerarán en este apartado las prácticas (20%) y los problemas y cuestiones propuestos por el profesor (10%).

Competencias evaluadas:

CG2, CG3, CG4, CG7, CG8, CG13
CE6-MAQA1, CE6-MAQA2, CE6-MAQA3, CE7-MAQA
CT1, CT2, CT3, CT4, CT5, CT7, CT8, CT11, CT12

PARTICIPACIÓN ACTIVA 5%

Se considerará la participación del alumno en las clases presenciales de teoría y de seminarios.

CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA DE SEPTIEMBRE

Como en la convocatoria de junio, el examen escrito de teoría contará el 65% de la nota final, siendo necesario obtener una calificación mínima de 4,5 sobre 10 para poder promediar con el resto de las actividades.

Aquellos alumnos que deseen mejorar, para la convocatoria de septiembre, su calificación en el apartado de actividades dirigidas, deberán resolver y entregar, con antelación a la realización del examen, un conjunto de problemas y ejercicios propuestos por el profesor. Posteriormente, en el examen de septiembre, el alumno deberá proceder a la resolución de uno o dos ejercicios, elegidos por el profesor, de entre todos los entregados.

Los alumnos que hayan suspendido las prácticas, siempre que hayan realizado la asistencia requerida, así como aquellos que deseen mejorar su calificación en este apartado, tendrán derecho a un examen final teórico y/o práctico.

PLANIFICACIÓN DE ACTIVIDADES – CRONOGRAMA

TEMA	ACTIVIDAD	HORAS	INICIO	FIN
1. Optimización y diseño experimental	Clase de teoría	5	1ª semana	2ª semana
	Clase de seminarios	1	3ª semana	3ª semana
2. Métodos multivariantes	Clase de teoría	4	3ª semana	5ª semana
	Seminario	1	5ª semana	5ª semana
Tutoría*				
3. Hibridación instrumental	Clase de teoría	7,5	6ª semana	8ª semana
	Seminario	1		
Tutoría*				
4. Automatización y miniaturización	Clase de teoría	6	8ª semana	10ª semana
	Seminario	1		
Tutoría*				
5. Química bioanalítica	Clase de teoría	4	10ª semana	12ª semana
	Seminario	1		
6. Sensores y biosensores	Clase de teoría	4	13ª semana	15ª semana
	Seminario	0,5		
Tutoría*				
7. Prácticas	A realizar en el laboratorio y aula de informática	9	7ª semana	
Examen final				

* Las tutorías programadas están sujetas a posibles modificaciones según la planificación del resto de asignaturas del curso.

RESUMEN DE LAS ACTIVIDADES

Actividad docente	Competencias asociadas	Actividad Profesor	Actividad alumno	Procedimiento de evaluación	P	NP	Total	C
Clases de teoría	CG2, CG3, CG4, CG7, CG13, CE6, CE7, CT3, CT7	Exposición de conceptos teóricos. Planteamiento de cuestiones.	Participación en las preguntas formuladas por el profesor. Formulación de preguntas y dudas.	Calificación de la participación activa en lo relacionado con los conceptos teóricos	30,5	58,5	90	5%
Seminarios	CG2, CG3, CG4, CG7, CG13, CE6, CE7, CT3, CT7	Aplicación de la teoría a la resolución de problemas. Planteamiento de cuestiones.	Resolución de ejercicios y cuestiones. Formulación de preguntas y dudas	Calificación de la participación activa en lo relacionado con la resolución de los ejercicios prácticos	5,5	9,5	15	
Actividades dirigidas	CG2, CG3, CG4, CG7, CG8, CG13 CE6, CE7 CT1, CT2, CT3, CT4, CT5, CT7, CT8, CT11, CT12	Elaboración y propuesta de trabajos. Valoración crítica de los mismos.	Elaboración por escrito del trabajo propuesto y relacionado con las prácticas en forma individual o en grupo.	Calificación del trabajo realizado		11	11	30%
Tutorías	CG2, CG3, CG4, CG7, CG8, CG13 CE6, CE7 CT1, CT2, CT3, CT4, CT5, CT7, CT8, CT11, CT12	Planteamiento de cuestiones y problemas.	Resolución de las cuestiones y problemas planteados.	Calificación de los ejercicios propuestos por el profesor.	4	6	10	
Prácticas	CG2, CG4, CG7, CG13 CE6, CE7 CT1, CT2, CT5, CT7, CT12	Aplicación de la teoría a la resolución de problemas de laboratorio	Elaboración de un cuaderno de prácticas, evaluación de resultados experimentales.	Calificación de los seminarios	9	7	15	
Exámenes	CG2, CG3, CG4, CG7, CG13, CE6, CE7, CT3, CT7	Propuesta y corrección del examen. Calificación del alumno.	Preparación y realización de los exámenes.	Calificación de los exámenes realizados.	9		9	65%

P : Presenciales; NP: no presenciales (trabajo autónomo); C: calificación