



FACULTAD DE  
CIENCIAS QUÍMICAS

# METODOLOGÍAS AVANZADAS EN QUÍMICA ANALÍTICA

GUÍA DOCENTE

Grado en Química

Curso 2023-2024



UNIVERSIDAD  
COMPLUTENSE  
MADRID



## I.- IDENTIFICACIÓN

<b>NOMBRE DE LA ASIGNATURA:</b>	<b>Metodologías Avanzadas en Química Analítica</b>
<b>NÚMERO DE CRÉDITOS:</b>	<b>6</b>
<b>CARÁCTER:</b>	<b>Optativa</b>
<b>MATERIA:</b>	<b>Química Analítica Avanzada</b>
<b>MÓDULO:</b>	<b>Avanzado</b>
<b>TITULACIÓN:</b>	<b>Grado en Química</b>
<b>SEMESTRE/CUATRIMESTRE:</b>	<b>Segundo semestre (cuarto curso)</b>
<b>DEPARTAMENTO:</b>	<b>Química Analítica</b>

### PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:

Grupo U	
Teoría Seminario Tutoría	<b>Profesora:</b> MARÍA EUGENIA DE LEÓN GONZÁLEZ <b>Departamento:</b> Química Analítica <b>Despacho:</b> QA-319-A <b>e-mail:</b> <a href="mailto:leongon@ucm.es">leongon@ucm.es</a>
Teoría Seminario Tutoría	<b>Profesora:</b> ESTEFANÍA MORENO GORDALIZA <b>Departamento:</b> Química Analítica <b>Despacho:</b> QB-438 <b>e-mail:</b> <a href="mailto:emorenog@ucm.es">emorenog@ucm.es</a>

Laboratorio QA302 / QA407 / Aula de informática					
Grupo	Cuatri.	Profesor/a	Correo	Despacho	Depar.
GU	2º	Noelia Rosales Conrado	<a href="mailto:nrosales@ucm.es">nrosales@ucm.es</a>	QA-322B	QA
GU	2º	Rebeca M. Torrente Rodríguez	<a href="mailto:rebecamt@ucm.es">rebecamt@ucm.es</a>	QB-437	QA
GU	2º	Gustavo Moreno Martín	<a href="mailto:gusmoren@ucm.es">gusmoren@ucm.es</a>	QA-402	QA

## 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: acoplamiento 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 Bioanalítica: inmunosensores; análisis clínicos

#### ■ PROGRAMA:

*Teórico*

##### **Tema 1: Métodos multivariantes**

- Multidimensionalidad de los datos.
- Análisis de la varianza.
- Métodos no supervisados (Análisis de Componentes Principales, Análisis de agrupamientos o clúster).
- Calibración multivariante (Regresión lineal clásica, inversa, mínimos cuadrados parciales, regresión de componentes principales).
- Análisis multicomponente.



### **Tema 2: Optimización y diseño experimental**

- Fundamentos.
- Tipos de diseños.
- Diseños simultáneos. Diseño factorial y otros diseños.
- Diseños secuenciales. Método Simplex.

### **Tema 3: Métodos acoplados**

- Introducción.
- Espectrometría de masas en tándem.
- Técnicas cromatográficas multidimensionales: cromatografía líquida multidimensional, cromatografía de gases multidimensional, acoplamiento LC-GC.
- Aplicaciones industriales y agroalimentarias.

### **Tema 4: Automatización y miniaturización**

- Automatización en un laboratorio de análisis: definiciones y conceptos.
- Automatización de las diferentes etapas de un proceso analítico.
- Analizadores continuos y discontinuos.
- Miniaturización.

### **Tema 5: Química Bioanalítica**

- Biomoléculas: Características y necesidades analíticas.
- Diferencias entre análisis dirigido y no dirigido. El laboratorio bioanalítico.
- Tratamiento de muestras biológicas. Aislamiento y purificación de ácidos nucleicos, proteínas y metabolitos. Aplicación de técnicas electroforéticas.
- Introducción al análisis de ácidos nucleicos: Determinación de DNA y RNA total. PCR; otras técnicas.
- Introducción al análisis de proteínas: Determinación de proteína total. Degradación de Edman. Identificación de proteínas mediante PMF y MS/MS.
- Introducción al análisis de metabolitos: Técnicas dirigidas (MRM) y no dirigidas (HRMS).
- Métodos enzimáticos.
- Técnicas de inmunoensayo.

### **Tema 6: Sensores y biosensores**

- Principios básicos (características operacionales).
- Elementos de reconocimiento (químicos, biológicos) y de transducción (electroquímicos, ópticos, térmicos, de masa).
- Introducción a los (bio)sensores químicos (tipos según biorreceptor y transductor, inmovilización de biorreceptores, ejemplos representativos).

### ***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 interdisciplinariamente.
- **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 de las técnicas análisis de ácidos nucleicos, metabolitos y proteínas.
- 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.
- Manejar un sistema semiautomático de análisis por inyección en flujo para multideterminación.

**VII. – HORAS DE TRABAJO Y DISTRIBUCIÓN POR ACTIVIDAD**

Actividad	Presencial (horas)	Trabajo autónomo (horas)	Créditos
Clases teóricas	30,5	59,5	3,64
Seminarios	5,5	9,5	0,6
Tutorías/Trabajos dirigidos	4	6	0,4
Prácticas	9	6	0,56
Preparación de trabajos y exámenes	9	11	0,8
<b>Total</b>	<b>58</b>	<b>92</b>	<b>6</b>

**VIII.- METODOLOGÍA**

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

- (a) **Clases 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., Varcácel, 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.
- F. Lottspeich, J. W. Engels (editores) “*Bioanalytics - Analytical Methods and Concepts in Biochemistry and Molecular Biology*” Wiley, 2018.
- S.R. Mikkelsen, E. Cortón “*Bioanalytical Chemistry*”, John Wiley –Interscience, 2016.
- J. Gross “*Mass spectrometry. A textbook*”, Springer, 2017.
- F. Bănică. “*Chemical Sensors and Biosensors: Fundamentals and Applications*”. Ed. John Wiley & Sons, 2012.

## 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 acceder a la evaluación final será necesario que el estudiante haya participado al menos en el 70 % del total de las actividades presenciales.

Si en la calificación de la memoria del trabajo realizado en las prácticas se comprobare que hay plagio o que los resultados y las preguntas incluidas en la memoria no se correspondiesen con el trabajo realizado en el laboratorio, la calificación final del laboratorio sería de SUSPENSO.

Las calificaciones de las actividades previstas para la evaluación de la asignatura (laboratorios, tutorías, entrega de problemas, controles) se comunicarán a los estudiantes con la antelación suficiente antes de la realización del examen final, para que puedan planificar adecuadamente el estudio de esta 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 JULIO**

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.

La evaluación del trabajo personal, actividades dirigidas y participación activa del curso se tendrá en cuenta también en la convocatoria extraordinaria (15 %), así como las prácticas (20%).

Los alumnos que hayan suspendido las prácticas, siempre que hayan realizado la asistencia requerida tendrán derecho a un examen final teórico y/o práctico.



PLANIFICACIÓN DE ACTIVIDADES – CRONOGRAMA

TEMA	ACTIVIDAD	HORAS	INICIO	FIN
1. Métodos multivariantes	Clase de teoría	6	1ª semana	3ª semana
	Clase de seminarios	2	3ª semana	3ª semana
2. Optimización y diseño experimental	Clase de teoría	5	4ª semana	5ª semana
	Seminario	1	5ª semana	6ª semana
<b>Tutoría*</b>				
3. Métodos acoplados	Clase de teoría	4,5	6ª semana	8ª semana
	Seminario	0,5		
<b>Tutoría*</b>				
4. Automatización y miniaturización	Clase de teoría	5	8ª semana	10ª semana
	Seminario	1		
<b>Tutoría*</b>				
5. Química bioanalítica	Clase de teoría	6	10ª semana	13ª semana
6. Sensores y biosensores	Clase de teoría	4	14ª semana	15ª semana
	Seminario	1		
<b>Tutoría*</b>				
7. Prácticas	A realizar en el laboratorio y aula de informática	9	7ª semana	
<b>Examen final</b>				

\* 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
<b>Clases de teoría</b>	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	59,5	90	5%
<b>Seminarios</b>	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	7,5	15	
<b>Actividades dirigidas</b>	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%
<b>Tutorías</b>	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	
<b>Prácticas</b>	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	6	15	
<b>Exámenes</b>	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%

