



Máster en Ciencia y Tecnología Químicas
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Complutense de Madrid

Guía docente
Escenarios 1, 2 y 3:

**EXPERIMENTACIÓN Y
MODELIZACIÓN AVANZADA EN
QUÍMICA: ESTRATEGIAS
ANALÍTICAS AVANZADAS PARA LA
RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS DE
INTERÉS CIENTÍFICO Y SOCIAL**

Código: 605197

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
CURSO 2020-2021

ESCENARIO 1. PRESENCIAL

Nombre de la asignatura (*Subject name*)

- Experimentación y Modelización Avanzada en Química: Estrategias analíticas avanzadas para la resolución de problemas de interés científico y social.

- *Advanced experimentation and modelling in Chemistry: Advanced analytical strategies for the resolution of selected social and scientific problems.*

Duración

Primer semestre

Créditos ECTS /Carácter

6 Créditos ECTS. Obligatoria

Contenidos básicos (*Subject knowledge*)

Técnicas y metodologías avanzadas de separación, ópticas y electroquímicas aplicadas en la resolución de problemas de interés clínico, ambiental y toxicológico.

Advanced separation, optical and electrochemical techniques and methodologies applied to the resolution of clinical, environmental and toxicological problems.

Coordinador, Profesores y ubicación

Coordinador/Profesor	Estefanía Moreno Gordaliza
Departamento	Química Analítica
Despacho	QB-437
Correo electrónico	emorenog@ucm.es

Profesor	María Pedrero Muñoz
Departamento	Química Analítica
Despacho	QA-305
Correo electrónico	mpedrero@quim.ucm.es

Profesor	Jon Sanz Landaluce
Departamento	Química Analítica
Despacho	QA-321A
Correo electrónico	jsanzlan@ucm.es

Profesor	Elena Benito Peña
Departamento	Química Analítica
Despacho	QB-437
Correo electrónico	elenabp@ucm.es

Profesor	Alfredo Sánchez Sánchez
Departamento	Química Analítica
Despacho	QB-433
Correo electrónico	alfredos@ucm.es

Profesor	Rebeca M. Torrente Rodríguez
Departamento	Química Analítica
Despacho	QA-312
Correo electrónico	rebecamt@ucm.es

Objetivos y competencias (*Abilities and Skills*)

OBJETIVOS

- 1.- Proporcionar una base sólida y equilibrada de conocimientos teóricos- prácticos que no se han adquirido en el Grado en Química haciendo especial hincapié en Química Analítica.
- 2.- Desarrollar capacidades para aplicar los conocimientos, tanto teóricos como prácticos, a la resolución de problemas analíticos en entornos nuevos o dentro de contextos poco conocidos tanto químicos como multidisciplinares.
- 3.- Generar en el estudiante, mediante la educación en Química Analítica, la sensibilidad necesaria para formular juicios, a partir de una información incompleta o limitada, que incluyan reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos.
- 4.- Desarrollar herramientas de aprendizaje, mediante el trabajo de laboratorio que permitan a los estudiantes continuar su formación de un modo autodirigido o autónomo.
- 5.- Generar en el estudiante el gusto por la investigación científica en Química Analítica.

ABILITIES

1. - *To give the proper basis of knowledge on theory and practice making special emphasis in Analytical Chemistry.*
- 2.- *To develop theoretical and practical abilities to solve relevant scientific problems in Analytical Chemistry to critically analyze, evaluate, and generate new and complex ideas in new field of chemistry and related areas.*
3. - *To develop learning tools in the laboratory that allow the students to follow the formation in an autonomous manner.*
4. - *To induce the enjoyment from the research in the student*

COMPETENCIAS GENERALES

- CG1.- Integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de problemas químicos.
CG2.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas para resolver problemas de interés científico y social en el contexto de la Química Analítica.
CG3.- Interpretar y analizar datos complejos en el entorno de la Química Analítica
CG4.- Reconocer y evaluar la calidad de los resultados teóricos y prácticos utilizando las herramientas metrológicas adecuadas.

GENERAL SKILLS

- GS1. - To integrate knowledge on chemistry, and to face up the complexity of questions in the area.
GS2. - To develop capabilities on theory and practice to resolve interesting scientific and social questions in the context of Analytical Chemistry.
GS3. - To analyze and evaluate complex ideas in the field of analytical chemistry.
GS4. - To recognize and evaluate the quality of theoretical and practical results by using the proper tools.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE1.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas en técnicas instrumentales de análisis.
CE2.- Planificar la experimentación de acuerdo a modelos teóricos o experimentales establecidos.
CE3.- Utilizar programas informáticos que permitan resolver problemas en el área de la Química Analítica.
CE4.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas para el análisis de diferentes sustancias químicas.
CE6.- Aplicar técnicas analíticas a la resolución de problemas químicos de análisis en diferentes entornos.
CE7.- Formular juicios a partir de información química en desarrollo, que incluya reflexión sobre responsabilidades sociales.

SPECIFIC SKILLS

- SS1. - To develop capabilities on theory and practice in the field of analytical instrumental techniques.*
SS2. - To design the research according to theoretical and experimental established models.
SS3. - To use of computational tools to ask and answer questions on the study of Analytical Chemistry.
SS4. - To develop capabilities on theory and practice for the analysis of different chemical substances.
SS6. - To apply instrumental analysis to solve analytical problems on different areas.
SS7. - To critically analyze and evaluate, new and complex information in the field of Analytical chemistry. To understand the social impact.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT1.- Elaborar, escribir y defender informes de carácter científico y técnico.

- CT2.- Trabajar en equipo.
- CT3.- Valorar la importancia de la sostenibilidad y el respeto al medio ambiente.
- CT4.- Demostrar capacidad de autoaprendizaje.
- CT5.- Demostrar compromiso ético.
- CT6.- Comunicar resultados de forma oral/escrita.
- CT7.- Trabajar con seguridad en laboratorios de investigación.
- CT8.- Demostrar motivación por la investigación científica.

GENERIC COMPETENCES

- GC1. - To elaborate, write, and defend scientific and technical reports.*
- GC2. - To work in multidisciplinary teams.*
- GC3. - To understand the importance of respecting and preserving the environment.*
- GC4. - To demonstrate the ability to learn independently.*
- GC5. - To show ethical commitment.*
- GC6. - To communicate results orally and in writing.*
- GC7. - To work safely in research laboratories.*
- GC8. - To show motivation for scientific research.*

Resultados de aprendizaje

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- 1- Identificar los objetivos del análisis de los distintos compuestos ensayados.
- 2- Conocer las ventajas e inconvenientes de las distintas técnicas analíticas mostradas.
- 3- Identificar las principales variables que afectan a la determinación de la(s) especies ensayadas y, por tanto, a la sensibilidad de la detección.
- 4- Saber aplicar herramientas matemáticas para el tratamiento de las señales obtenidas.
- 5- Saber calcular el contenido del (los) analitos determinados en la muestra original en base a un calibrado.
- 6- Expresar correctamente los datos obtenidos y discutir los resultados calculados en base a representaciones gráficas.
- 7- Desarrollar un informe en formato “científico” para que sirva de base para la exposición oral del trabajo fin de master.
- 8- Conocer las ventajas del empleo de un material de referencia como técnica de validación de un método analítico.
- 9- Conocer la importancia del diseño experimental para la optimización de la respuesta analítica. Ser capaz de plantear y aplicar un diseño experimental.
- 10- Aplicar procedimientos quimiométricos de análisis de superficie de respuesta (RSA) y de análisis multirrespuesta (MRA).
- 11- Analizar parámetros cromatográficos para deducir las condiciones de separación óptimas.
- 12- Conocer la importancia de la determinación de residuos de antibióticos en alimentos y familiarizarse con las normativas europeas vigentes que marcan las directrices de análisis para este tipo de muestras y contaminantes.
- 13- Conocer las ventajas y desventajas de las diferentes técnicas de extracción habitualmente utilizadas para la extracción de contaminantes en muestras alimentarias.
- 14- Familiarizarse con las técnicas de extracción con líquido presurizados y cromatografía líquida con detección fluorescente.

- 15- Aplicar métodos electroquímicos en la detección de biomarcadores de importancia clínica.
- 16- Comprender y aplicar las ventajas de las técnicas multi-respuesta, en especial las que combinan simultáneamente técnicas electroquímicas y espectroscópicas.
- 17- Aplicar métodos basados en inmunoensayos luminiscentes para la determinación de contaminantes alimentarios.

LEARNING OUTCOMES

1. *Identify the objectives of the analysis of the various compounds tested.*
2. *To know the advantages and disadvantages of different analytical techniques shown.*
3. *Identify the main variables that affect the determination of the tested species and therefore, the detection sensitivity.*
4. *To know apply mathematical tools for the treatment of obtained signals.*
5. *Learn to calculate the content of the (those) analytes determined in the original sample based on a calibration.*
6. *Express correctly the data and discuss results calculated bases on graphical representations.*
7. *To develop a report on "scientific" format so that serves as the basis for the oral presentation of the Master Degree.*
8. *Find out the advantages of the use of a reference material as a technique of validation of an analytical method.*
9. *To know the importance of experimental design for the optimization of the analytical response. Being able to propose and implement an experimental design.*
10. *Apply chemometric procedures of response surface analysis (RSA) and multi-choice analysis (MRA).*
11. *Analyze chromatographic parameters to derive the optimum separation conditions.*
12. *Understanding the importance of food quality by the determination of antibiotic residues in food samples and get familiar with some regulation documents of the European Union involving performance of analytical methods and antibiotic residues in foodstuff.*
13. *Understanding the advantages and disadvantages of different extraction techniques for the analysis of food samples.*
14. *Improve the ability to perform a full method to determine residues of antibiotics in food by pressurized liquid extraction and further quantification by liquid chromatography with fluorescence detection.*
15. *To apply electrochemical methods for the detection of biomarkers with clinical relevance.*
16. *To understand and apply the advantages of multi-response techniques, particularly those combining electrochemical and spectroscopic techniques simultaneously.*
17. *To apply methods based on luminescent immunoassays for the determination of food contaminants.*

Contextualización en el Máster

La asignatura pertenece al Módulo 1 (obligatorio). "Métodos teóricos y experimentales en Química" y a la materia (obligatoria) 1.1 "Experimentación y modelización avanzada en Química".

Programa de la asignatura

- 1.- Especiación mediante HPLC-ICP/MS de elementos traza de interés toxicológico
Duración 2 sesiones: 8 h
- 2.- Empleo de técnicas de espectroscopia de impedancia electroquímica, resonancia de plasmón superficial y microbalanza de cristal de cuarzo en el desarrollo de un biosensor
Duración 1 sesión: 4 h
- 3.- Determinación de residuos de antibióticos en alimentos mediante extracción con disolventes presurizados y análisis cromatográfico
Duración 2 sesiones: 8 h
- 4.- Determinación de residuos de medicamentos en muestras biológicas mediante cromatografía de gases acoplada a espectroscopia de masas
Duración 2 sesiones: 8 h
- 5.- Optimización de la separación cromatográfica de serotonina y sus precursores, L-triptófano y 5-OH-triptófano, mediante cromatografía líquida capilar
Duración 2 sesiones: 8 h
- 6.- Detección de biomarcadores clínicos mediante métodos electroquímicos
Duración 1 sesión: 4 h
- 7.- Análisis cuantitativo mediante experimentos multi-respuesta
Duración 1 sesión: 4 h
- 8.- Control de micotoxinas en alimentos mediante inmunoensayos luminiscentes
Duración 1 sesión: 4 h

Evaluación del aprendizaje

En la convocatoria ordinaria, el rendimiento académico del estudiante se computará atendiendo a la calificación obtenida en el examen escrito y la evaluación de su trabajo personal según los siguientes porcentajes:

- Examen escrito referente a las prácticas realizadas: 30%
- Trabajo personal, asistencia y realización de prácticas de laboratorio: 60%
- Asistencia y participación en seminarios: 10%

Para poder ser evaluado el estudiante deberá haber participado, al menos, en el 70% de las actividades presenciales. La realización de las prácticas es obligatoria y la no asistencia a 3 o más prácticas será motivo para suspender la asignatura. Así mismo, para promediar con el resto de actividades, será necesario obtener al menos una calificación de 4.0 en el examen escrito. De lo contrario, el alumno estará suspenso.

Los alumnos que no hayan obtenido una calificación final igual o superior a 5.0 deberán realizar un examen escrito en la convocatoria extraordinaria de la asignatura. Las notas correspondientes a los seminarios y prácticas de laboratorio obtenidas en la convocatoria ordinaria se mantendrán en esta convocatoria, al igual que los porcentajes otorgados a cada una de las partes que se someten a evaluación en la convocatoria ordinaria. Así mismo, el alumno tendrá la opción, sólo en la convocatoria extraordinaria, de aumentar la nota obtenida en las prácticas suspensas en la

convocatoria ordinaria. Para ello, deberá resolver una serie de cuestiones y/o problemas relacionados con la práctica, que serán establecidos por el profesor correspondiente. Para superar la asignatura en la convocatoria extraordinaria será necesario obtener, una vez aplicados los porcentajes correspondientes, una calificación final de igual o superior a 5.0.

Las calificaciones, en ambas convocatorias, estarán basadas en la puntuación absoluta sobre 10 puntos y de acuerdo con la escala establecida en el RD 1125/2003.

Metodología y programación docente

La práctica docente se desarrollará a través de las clases prácticas llevadas a cabo en el laboratorio (3.5 créditos) y clases de seminarios donde se discutirá y ampliará el conocimiento adquirido en las clases prácticas (1.8 créditos).

Las prácticas se realizarán en grupos pequeños de alumnos y, al terminar las mismas, elaborarán un informe individual sobre el trabajo realizado.

El material necesario para el desarrollo de las prácticas se pondrá a disposición de los alumnos en el *Campus Virtual* de la asignatura.

PROGRAMACIÓN DOCENTE

Actividad	Presencial (horas)	Trabajo autónomo (horas)	Créditos ECTS
Seminarios/Seminars	18	27	1,8
Laboratorio/Laboratory	50	37,7	3,5
Preparación de trabajos/memoria de laboratorio y exámenes	4	13,3	0,7
Total	72	78	6

Idioma o idiomas en que se imparte

Español

Bibliografía y recursos complementarios

1. Methods for environmental trace analysis. John R. Dean. Wiley 2003.
2. Trace element speciation for environment, food and health. L. Ebdon, L. Pitts, R. Cornelis, H. Crews, O.F.X. Donard and Ph. Quevauviller. RS.C. 2001.
- 3.-Técnicas analíticas de contaminantes químicos para aplicaciones toxicológicas, medioambientales y alimentarias. Miguel Angel Sorgob Sánchez y Eugenio Vilanova Gisbert. Diaz de Santos, 2004.
4. Environmental analytical chemistry. F.W. Fifield and P.J. Haines. Blackie Academic and Professional. 1997.
- 5.-"Analytical Electrochemistry", J. Wang, Wiley-VCH, New York, 2006.
- 6.- Electroanalytical methods for biological materials", A. Brajter-Toth, J.Q. Chambers, eds., Marcel Dekker, New York, 2002.
7. - Advances in Chromatography. Editors Eli Grushka y Nelu Grinberg. CRC Taylor & Francis, New York, 2004.
8. - Chiral Separation Techniques. A practical Approach. Editor Ganapy Subramanian. Wiley-VCH, Weinheim, Alemania, 2007.

9. - Multidimensional Liquid Chromatography. Edited by Steven A. Cohen and Mark R. Schure. John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, 2008.
10. - Qualitative analysis of organics in atmospheric particulates by headspace solid phase microextraction GC/MS. O. Kanal, D. Shooter. *Atmospheric Environment*, 38, 6917-6925 (2004).
- 11.- Commission Regulation 1353/2007/EC of 20th November, amending Council Regulation 2377/90/EC laying down a Community procedure for the establishment of maximum residue limits of veterinary medicinal products in foodstuffs of animal origin. Off. J. L 303 2007
- 12.- Commission Decision 2002/657/EC of 12th August implementing Council Directive 96/23/EC concerning the performance of analytical methods and the interpretation of the results. Off. J. L 221 2002.
- 13.- Food Contaminants and Residue Analysis, Volume 51 (Comprehensive Analytical Chemistry) 1st Edition, Elsevier Science 2008.
- 14.- T.E. Keyes, R.J. Forster. Spectroelectrochemistry. C.G. Zoski (Ed.), Handbook of Electrochemistry, Elsevier, Amsterdam (2007), pp. 591-635.
- 15.- M. Neves, P. Bobes-Limenes, A. Perez-Junquera, M.B. Gonzalez-Garcia, D. Hernandez-Santos, P. Fanjul-Bolado. Miniaturized analytical instrumentation for electrochemiluminescence assays: a spectrometer and a photodiode-based device. *Anal. Bioanal. Chem.*, 408 (2016), pp. 7121-7127.
- 16.- The Immunoassay Handbook. Theory and Applications of Ligand Binding, ELISA and Related Techniques, 4th Edition, Ed. David Wild, Elsevier 2013.

ESCENARIO 2. SEMIPRESENCIAL

Metodología

- Los **Seminarios** previos a la realización del laboratorio o posteriores se realizarán en línea a través del Campus Virtual, de forma síncrona o asíncrona. Se acompañarán de un cuestionario en línea disponible en el CV que el estudiante deberá haber resuelto antes de entrar en el laboratorio (seminarios previos) o antes de darlo por finalizado (seminario final).
 - El material docente utilizado será las presentaciones de clase habilitadas en el Campus Virtual UCM empleadas también en el Escenario 1, presentaciones PowerPoint acompañadas de grabaciones de voz donde se incluyen las explicaciones necesarias como si fuese una clase presencial, así como vídeos relacionados con la materia y otros tipos de materiales que los profesores de la asignatura consideran de relevancia e interés. Todo el material estará con antelación a disposición de los estudiantes a través del Campus Virtual para su utilización.
 - Los medios telemáticos utilizados para las sesiones síncronas serán la herramienta Blackboard Collaborate (de uso preferente), disponible en el CV, u otras plataformas de videoconferencia como Google Meet.
- **Prácticas de laboratorio** previstas con una presencialidad general mínima del 60 % para poder cumplir con la distancia social necesaria. Atendiendo a las particularidades de cada práctica, si es posible en algún caso la presencialidad podrá verse modificada ligeramente. La organización docente experimental se sustenta en los siguientes aspectos:
 - La impartición de cada sesión práctica se estructura en tres partes: introducción teórico-práctica, procedimiento experimental y tratamiento de resultados.
 - La introducción teórico-práctica previa que se imparte en cada práctica será publicada en el Campus Virtual junto con un cuestionario en línea editado en el CV que el estudiante deberá haber resuelto antes de entrar en el laboratorio a realizar la práctica.
 - El procedimiento experimental se desarrollará de forma presencial. En los casos en los que esto no pueda ser viable se prevé la utilización de material grabado.
 - Una vez realizada la parte experimental, los estudiantes realizarán el tratamiento de datos y preparación de la Memoria fuera del laboratorio. Los profesores estarán disponibles en un horario que se definirá en el Campus Virtual para la resolución de dudas con sesiones virtuales síncronas con Blackboard Collaborate o Chat; y/o mediante medios asíncronos disponibles en el Campus Virtual, como Foros permanentes de resolución de dudas.
 - El material docente empleado será el mismo que el utilizado en el Escenario 1, además de material escrito en forma de manuales, resultados numéricos y gráficos y/o presentaciones en PowerPoint acompañadas de explicaciones o vídeos.

- Todo el material estará a disposición de los alumnos con antelación a través del Campus Virtual.

- **Tutorías Individuales**

Se realizarán por vídeo conferencia y/o correo electrónico.

- **Seguimiento del alumnado**

En la parte de docencia que se realiza de forma presencial se seguirán las mismas técnicas empleadas de forma tradicional.

En la parte de docencia virtual el seguimiento se realizará por diversas técnicas, según considere el profesor: mediante la herramienta de registro de actividades de cada sesión (Collaborate), análisis de descargas efectuadas por los alumnos en el CV, etc.

Evaluación del aprendizaje

Se realizarán exámenes presenciales y la evaluación descrita en el procedimiento del Escenario 1.

ESCENARIO 3. TOTALMENTE VIRTUAL

Metodología

- Seminarios que se realizarán en línea a través del Campus Virtual, de forma síncrona o asíncrona. Se acompañarán de cuestionarios en línea disponibles en el CV que el estudiante deberá resolver.
 - El material docente utilizado será las presentaciones de clase habilitadas en el Campus Virtual UCM empleadas también en los Escenarios 1 y 2. Como en los Escenarios anteriores, todo el material estará con antelación a disposición de los estudiantes a través del Campus Virtual para su utilización.
 - Los medios telemáticos utilizados serán las plataformas ya mencionadas en el Escenario 2: la herramienta Blackboard Collaborate (de uso preferente), disponible en el CV, u otras plataformas de videoconferencia como Google Meet.
- **Prácticas de laboratorio**, que se desarrollarán como en el Escenario 2, pero el procedimiento experimental presencial será reemplazado por distintas posibles alternativas: material escrito a modo de tutorial donde se describa detalladamente el procedimiento, grabaciones o presentaciones en PowerPoint acompañadas de narración previas de los experimentos y/o vídeos de experiencias similares que garanticen la adquisición de las habilidades y competencias que se pretende.
- **Las tutorías individuales** se realizarán como en el Escenario 2.
- **Seguimiento del alumnado**
Se realizará igual que lo descrito en el Escenario 2 para la docencia virtual.

Evaluación del aprendizaje

DESCRIPCIÓN DEL PROTOCOLO DE EVALUACIÓN

- **Identificación de estudiantes:**
Se registrará la actividad de los alumnos en el Campus Virtual de la asignatura, al que tienen acceso mediante usuario y contraseña. Adicionalmente se comprobará la identidad de cada alumno mediante visualización de su DNI a través de una sesión de vídeo y audio mediante la aplicación Google Meet, que se mantendrá activa durante todo el examen. Como paso previo a la realización del examen, los alumnos deberán entregar un documento de compromiso escrito a mano y digitalizado en formato PDF, en el que figure una fotocopia de su documento identificativo y una declaración de participación en la prueba sin utilizar ningún recurso (material o humano) diferente a los autorizados previa y expresamente por el profesorado asumiendo, en caso contrario, toda responsabilidad administrativa y disciplinaria que pudiera derivarse de la

utilización de medios defraudatorios. El texto del documento, elaborado por el Departamento, estará disponible en el espacio de la asignatura del Campus Virtual.

- **Tipo de examen:**

El examen se diseñará en el Campus Virtual (Moodle) empleando las herramientas disponibles de Cuestionarios. La duración máxima del examen será de 3 horas.

- **Seguimiento de estudiantes durante la prueba:**

El nivel de seguimiento será avanzado, detectando comportamientos extraños en cuanto al uso del Campus Virtual, tras analizar los registros de acceso al Campus de cada usuario particular. Este mecanismo simple asíncrono no invasivo se complementará con un visionado síncrono aleatorio de estudiantes y su área de trabajo durante la prueba, mediante sesión Google Meet. Asimismo, al terminar el examen, los alumnos deberán permanecer conectados media hora más y el profesor podrá pedir a un subconjunto de ellos que, o bien mediante videoconferencia o vídeo grabado, expliquen detalles de la prueba enviada.

- **Revisión de exámenes:**

La revisión de los exámenes se realizará bien mediante el sistema de retroalimentación en las pruebas realizadas mediante la herramienta “Cuestionario”, o bien y previa solicitud de los estudiantes interesados, mediante grupos de trabajo con los profesores de la asignatura en una sesión de Blackboard Collaborate o Google Meet.

- **Mecanismo empleado para la documentación/grabación de las pruebas de evaluación para su posterior visualización y evidencia:**

Los profesores se descargarán los archivos entregados durante el examen, así como los informes de los cuestionarios con las respuestas detalladas y su calificación, para conservarlos grabados en su ordenador. Asimismo, se grabarán tanto los exámenes como las revisiones de estos.