



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

Guía docente

**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 2022-2023

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

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

Profesor	Jorge O. Cáceres Gianni
Departamento	Química Analítica
Despacho	QB-342G
Correo electrónico	jcaceres@ucm.es

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

Profesora	María Gamella Carballo
Departamento	Química Analítica
Despacho	QB-435
Correo electrónico	mariagam@ucm.es

Profesora	Verónica Serafín González-Carrato
Departamento	Química Analítica
Despacho	QB-435
Correo electrónico	veronicaserafin@ucm.es

Profesor	Víctor Ruiz-Valdepeñas Montiel
Departamento	Química Analítica
Despacho	QA-402
Correo electrónico	vrvmontiel@ucm.es

Profesora	Beatriz Gómez Gómez
Departamento	Química Analítica
Despacho	QA-402
Correo electrónico	beatrgom@ucm.es

Profesor	Gustavo Moreno Martín
Departamento	Química Analítica
Despacho	QA 416B
Correo electrónico	gusmoren@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.
CE5.- Aplicar técnicas analíticas a la resolución de problemas químicos de análisis en diferentes entornos.
CE6.- 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.*
SS5. - *To apply instrumental analysis to solve analytical problems on different areas.*
SS6. - *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 acoplamiento de las técnicas cromatográficas a la espectrometría de masas elemental para el análisis de especiación de elementos tóxicos en alimentos y la comprobación del cumplimiento de la normativa europea para la seguridad alimentaria.
- 10- Analizar parámetros cromatográficos para deducir las condiciones de separación óptimas.
- 11- Conocer la importancia de la determinación de residuos de antibióticos, y otros contaminantes, en alimentos, y familiarizarse con las normativas europeas vigentes que marcan las directrices de análisis para este tipo de muestras y contaminantes.

- 12- Conocer las ventajas y desventajas de las diferentes técnicas de extracción habitualmente utilizadas para la extracción de contaminantes en muestras alimentarias.
- 13- Familiarizarse con las técnicas de extracción con líquido presurizados y cromatografía líquida con detección fluorescente.
- 14- Aplicar métodos electroquímicos en la detección de biomarcadores de importancia clínica.
- 15- Comprender y aplicar las ventajas de las técnicas multi-respuesta, en especial las que combinan simultáneamente técnicas electroquímicas y espectroscópicas.
- 16- Aplicar métodos basados en inmunoensayos luminiscentes para la determinación de contaminantes alimentarios.
- 17- Estudiar la prevención de riesgos asociado al uso de láseres de alta potencia. Analizar parámetros de la espectroscopia de plasma inducida por láser y analizar espectros de muestras complejas mediante algoritmos avanzados como redes neuronales usando Matlab.

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. *Understanding the importance of chromatographic techniques coupled to elemental mass spectrometry for speciation analysis of foodstuff and checking compliance with European regulations on food security.*
10. *Analyze chromatographic parameters to derive the optimum separation conditions.*
11. *Understanding the importance of food quality by the determination of antibiotic residues, and other contaminants, in food samples and get familiar with some regulation documents of the European Union involving performance of analytical methods and antibiotic residues in foodstuff.*
12. *Understanding the advantages and disadvantages of different extraction techniques for the analysis of food samples.*
13. *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.*
14. *To apply electrochemical methods for the detection of biomarkers with clinical relevance.*
15. *To understand and apply the advantages of multi-response techniques, particularly those combining electrochemical and spectroscopic techniques simultaneously.*

16. *To apply methods based on luminescent immunoassays for the determination of food contaminants.*
17. *Study the prevention of risks associated with the use of high power lasers. Analyze parameters of laser-induced plasma spectroscopy and analyze spectra of complex samples by means of advanced algorithms such as neural networks using Matlab.*

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 espectrometría de masas
Duración 2 sesiones: 8 h
- 5.- Técnicas Espectroscópicas láser para el análisis de muestras complejas
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. Si en la

calificación de la memoria del trabajo realizado se comprobase 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. 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 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.