


	<b>PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX</b>		 Facultad de Ciencias
	<b>Curso académico:</b> 2024-25	<b>Código:</b> P/CL009_FC_D002	

### PLAN DOCENTE DE LA ASIGNATURA

Identificación y características de la asignatura			
Código	501846	Créditos ECTS	6
Denominación (español)	Química Analítica Avanzada		
Denominación (inglés)	Advanced Analytical Chemistry		
Titulaciones	Grado en Química		
Centro	Facultad de Ciencias		
Semestre	6º	Carácter	Obligatorio
Módulo	Fundamental		
Materia	Química Analítica		
Profesorado			
Nombre	Despacho	Correo-e	Página web
Arsenio Muñoz de la Peña Castrillo (GG, L)	4ª Planta Edificio de	<a href="mailto:arsenio@unex.es">arsenio@unex.es</a>	<a href="http://campusvirtual.unex.es/portal/">http://campusvirtual.unex.es/portal/</a>
Mª Isabel Rodríguez Cáceres (GG)	Química (J.M.	<a href="mailto:maribelro@unex.es">maribelro@unex.es</a>	
Nielene Mora Díez (L)	Viguera Lobo)	<a href="mailto:nielene@unex.es">nielene@unex.es</a>	
Área de conocimiento	Química Analítica		
Departamento	Química Analítica		
Profesor/a coordinador/a (si hay más de uno)	Arsenio Muñoz de la Peña Castrillo		
Competencias			
<b>1. COMPETENCIAS BÁSICAS</b>			
<p>CB3: Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.</p> <p>CB4: Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.</p>			
<b>2. COMPETENCIAS GENERALES</b>			
<p>CG1: Que los estudiantes se involucren en la tarea intelectualmente estimulante y satisfactoria del proceso de aprendizaje.</p> <p>CG4: Que los estudiantes desarrollen habilidades/capacidades de comprensión, interpretación, aplicación y transmisión (de forma oral y por escrito) de sus conocimientos químicos, teóricos y prácticos.</p>			
<b>3. COMPETENCIAS TRANSVERSALES</b>			

	<b>PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX</b>		
	<b>Curso académico:</b> 2024-25	<b>Código:</b> P/CL009_FC_D002	

CT2: Capacidad de comunicar de una forma clara y precisa conocimientos y conclusiones a un público tanto especializado como no especializado.

CT5: Demostración de sensibilidad hacia temas medioambientales

CT8: Motivación por la calidad

CT9: Conocimiento de una lengua extranjera (preferentemente inglés).

CT10: Utilización de las tecnologías de la información y la comunicación (TIC's) más adecuadas en cada situación.

#### 4. **COMPETENCIAS ESPECÍFICAS**

CE5: Diferenciar los tipos principales de reacción química: Principios de termodinámica, cinética y electroquímica.

CE8: Diferenciar principios y procedimientos empleados en el análisis químico para la determinación, identificación y caracterización de elementos y compuestos químicos. Deducir aplicaciones de las técnicas.

CE12: Efectuar al tratamiento matemático de datos procedentes de procesos químicos y gestión de calidad de los laboratorios.

CE15: Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.

CE16: Resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.

CE18: Capacidad para desenvolverse con seguridad en un laboratorio químico, que se concreta en el manejo de productos, materiales e instrumentación química mediante metodologías apropiadas y con un cumplimiento estricto de las normas de seguridad estipuladas. Valoración de riesgos.



CE19: Evaluación, interpretación y síntesis de datos e información química. Obtención, procesamiento y tratamiento, mediante técnicas computacionales, de datos químicos.

CE20: Ejecución de procedimientos estándares de laboratorios implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.

CE21: Interpretación de datos derivados de observaciones y medidas en el laboratorio.

CE26: Comprensión de los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.

### Contenidos

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX		
	Curso académico: 2024-25	Código: P/CL009_FC_D002	

### Breve descripción del contenido

La asignatura Química Analítica Avanzada es una asignatura obligatoria, de tercer curso del Grado de Química, que se desarrolla mediante la impartición de clases teóricas expositivas, seminarios de problemas relativos a los temas de Cinética y de Quimiometría, clases prácticas de laboratorio, relativas a los Métodos Cinéticos y a las Técnicas de Análisis Automático, FIA, SIA, Quimiometría y Sensores.

### Temario de la asignatura

#### Bloque I. MÉTODOS CINÉTICOS

##### Tema 1: Métodos cinéticos de análisis (4h)

- 1.1. Introducción. Tipos de reacciones que pueden utilizarse en métodos cinéticos de análisis.
- 1.2. Clasificación. Conceptos fundamentales. Velocidad de las reacciones químicas. Leyes de velocidad.
- 1.3. Ecuaciones cinéticas para reacciones catalíticas. Métodos experimentales para el estudio de la cinética de las reacciones químicas. Instrumentación.

##### Tema 2: Métodos catalíticos (enzimáticos y no enzimáticos) de análisis (3h)

- 2.1. Métodos de medida utilizados. Métodos diferenciales. Métodos integrales. Medida del período de inducción.
- 2.2. Factores que afectan a la velocidad de las reacciones catalíticas. Activadores e inhibidores.
- 2.3. Aplicaciones de las reacciones catalíticas.

##### Tema 3: Métodos cinéticos no catalíticos (3h)

- 3.1. Reacciones no catalizadas usadas en métodos cinéticos. Métodos no catalíticos para la determinación de un único componente.
- 3.2. Métodos no catalíticos para la determinación de mezclas. Análisis de dos sustancias que reaccionan a diferente velocidad con el mismo reactivo. Métodos cinéticos diferenciales.



##### 1. Práctica de Métodos Cinéticos (Temas 1-3) (6h): Determinación cinético-fotométrica de 2- furfuraldehído en bebidas alcohólicas.

Se llevará a cabo la determinación cinético-fotométrica del 2-furfuraldehído (FUR) mediante la reacción de derivatización conocida como reacción de Winkler, aplicándose a su análisis en bebidas alcohólicas.

#### Bloque II. AUTOMATIZACIÓN

##### Tema 4: Automatización en el laboratorio analítico (3h)

- 4.1. Objetivos de la automatización. Definiciones. Ventajas e inconvenientes de la automatización. Grados de automatización. Clasificación de los analizadores automáticos.

	<b>PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX</b>		
	<b>Curso académico:</b> 2024-25	<b>Código:</b> P/CL009_FC_D002	

- 4.2. Uso de ordenadores en el control de instrumentos, adquisición y proceso de datos. Automatización de la instrumentación analítica.
- 4.3. Automatización de la toma de muestra. Muestreo de sólidos, líquidos y gases.
- 4.4. Automatización de los diversos procesos de tratamiento de la muestra: disolución, digestión, volatilización, destilación, filtración, cambio iónico, extracción sólido-líquido y líquido-líquido.

**Tema 5: Métodos automáticos de análisis de flujo continuo (I) (3h)**

- 5.1. Analizadores de flujo segmentado. Esquema general, componentes, configuraciones multicanal. Aplicaciones.
- 5.2. Analizadores de flujo no segmentado. Introducción al análisis por inyección en flujo: definición y propiedades características. FIAGRAMA: parámetros más importantes.
- 5.3. Dispersión parcial como fundamento del FIA.
- 5.4. Componentes básicos de un sistema FIA: Sistema de propulsión, sistema de transporte y reacción y sistema de detección.
- 5.5. Análisis por inyección secuencial (SIA). Instrumentación. Ventajas e inconvenientes frente al FIA. Lab-on-valve.

**Tema 6: Métodos automáticos de análisis de flujo continuo (II) (5h)**

- 6.1. Aplicaciones del FIA. Modalidades primarias. Técnicas FIA en gradiente.
- 6.2. Métodos cinéticos desarrollados por FIA: Métodos FIA basados en la interrupción del flujo (stopped flow) y métodos FIA basados en cinética diferencial.
- 6.3. Modalidades FIA utilizando dos fases



**2. Práctica de Métodos Automáticos (Temas 4-6) (6h): Determinación de nitritos en aguas naturales mediante FIA/SIA.**

Se llevará a cabo la determinación espectrofotométrica de nitritos mediante la reacción de diazotación de la sulfanilamida en medio ácido y posterior reacción con la 1-naftiletildiamina, utilizando métodos semi-automáticos basados en las técnicas de FIA/SIA, aplicándose a su análisis en aguas naturales.

**Bloque III. QUIMIOMETRÍA**

**Tema 7: Introducción a la Quimiometría. Calibración Univariante (5h)**

- 7.1. Introducción a la Quimiometría.
- 7.2. Calibración. Dependencia entre dos variables. Regresión lineal por mínimos cuadrados.
- 7.3. Caracterización de un resultado analítico obtenido a partir de una recta de calibrado. Mínimos cuadrados ponderados.
- 7.4. Parámetros de calidad de un método analítico: Linealidad, Sensibilidad Analítica, Precisión, Límite de detección, Límite de Cuantificación.
- 7.5. Método de la adición estándar.

	<b>PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX</b>		
	<b>Curso académico:</b> 2024-25	<b>Código:</b> P/CL009_FC_D002	

**Tema 8: Tests de Comparación. Métodos de filtrado. Métodos de optimización (6h)**  
 8.1. Tests de Comparación. Análisis de la varianza.  
 8.2. Detección y manipulación de señales analíticas. Filtrado. Método de Savitzky-Golay.  
 8.3. Métodos de optimización. Método Simplex. Métodos factoriales.

**Tema 9: Calibración multivariante (6h)**  
 9.1. Análisis de multicomponentes mediante Calibración Multivariante. Método de Regresión Lineal Múltiple  
 9.2. Métodos de Mínimos Cuadrados Clásicos (CLS)  
 9.3 Mínimos Cuadrados Inversos (ILS)  
 9.4 Regresión en Componentes Principales (PCR) y Mínimos Cuadrados Parciales (PLS)



**3. Práctica de Análisis Quimiométrico de los datos experimentales adquiridos por el estudiante en el laboratorio en las dos prácticas anteriores (Temas 7-9) (3h).**  
 Análisis de calibración univariante y establecimiento de parámetros de calidad del método.

**Bloque IV. SENSORES**

**Tema 10: Sensores Químicos (3h)**  
 10.1. Definición de sensor  
 10.2. Componentes básicos de un sensor químico  
 10.3. Clasificación de los sensores químicos  
 10.4. Sensores electroquímicos y sensores ópticos

Actividades formativas

Horas de trabajo del alumno/a por tema		Horas Gran grupo	Actividades prácticas				Actividad de seguimiento	No presencial
Tema	Total	GG	CH	L	O	S	TP	EP
1	12	4						8
2	17	3						4
3	16	3		6			1	6
4	9	3						6
5	9	3						6
6	21	5		6			1	9
7	14	5						9
8	15	6						9
9	21	5		3			1	12
10	9	3						6

	<b>PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX</b>		
	<b>Curso académico:</b> 2024-25	<b>Código:</b> P/CL009_FC_D002	

Evaluación	17	5					12
<b>TOTAL</b>	<b>150</b>	<b>45</b>		<b>15</b>		<b>3</b>	<b>87</b>



GG: Grupo Grande (85 estudiantes).  
 CH: prácticas clínicas hospitalarias (7 estudiantes)  
 L: prácticas laboratorio o campo (15 estudiantes)  
 O: prácticas sala ordenador o laboratorio de idiomas (20 estudiantes)  
 S: clases problemas o seminarios o casos prácticos (40 estudiantes).  
 TP: Tutorías Programadas (seguimiento docente, tipo tutorías ECTS).  
 EP: Estudio personal, trabajos individuales o en grupo, y lectura de bibliografía.

### Metodologías docentes

- 1. Clases expositivas de teoría y problemas.** Método expositivo que consiste en la presentación por parte del profesor de los contenidos sobre la materia objeto de estudio. También incluye la resolución de problemas ejemplo por parte del profesor.
- 2. Resolución, análisis y discusión de problemas prácticos propuestos.** Método basado en el planteamiento de problemas por parte del profesor y la resolución de los mismos en el aula. Los estudiantes desarrollan e interpretan soluciones adecuadas a partir de la aplicación de procedimientos de resolución de problemas.
- 5. Aprendizaje a partir de la experimentación.** Método de enseñanza-aprendizaje basado en el método científico en el que el estudiante plantea hipótesis, experimenta, recopila datos, busca información, aplica modelos, contrasta las hipótesis y extrae conclusiones.
- 7. Aprendizaje a través del aula virtual.** Situación de enseñanza/aprendizaje en la que se usa un ordenador con conexión a la red como sistema de comunicación entre profesor y estudiante e incluso entre los estudiantes entre si y se desarrolla un plan de actividades formativas.
- 8. Tutorización.** Situación de enseñanza/aprendizaje en la que el profesor de forma individualizada o en pequeños grupos orienta al estudiante en su aprendizaje.
- 9. Aprendizaje autónomo.** Situación de aprendizaje en la que el estudiante, de forma autónoma, profundiza en el estudio de una materia para adquirir las competencias.
- 10. Evaluación.** Situación de aprendizaje/evaluación en la que el alumno realiza alguna prueba que sirve para reforzar su aprendizaje y como herramienta de evaluación.

### Resultados de aprendizaje

1. Ser capaz de aplicar las reacciones cinéticas al análisis químico
2. Conocer la importancia de la automatización y la robótica en los laboratorios de análisis, así como sus aplicaciones en distintos campos de la Química Analítica, incluyendo el análisis de rutina

	<b>PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX</b>		
	<b>Curso académico:</b> 2024-25	<b>Código:</b> P/CL009_FC_D002	

3. Profundizar en los aspectos fundamentales de la técnica de análisis en flujo (FIA/SIA) y experimentar la técnica en el laboratorio
4. Ser capaz de utilizar sensores en aplicaciones analíticas
5. Comprender y utilizar las principales aplicaciones de la Quimiometría en el proceso analítico

### Sistemas de evaluación

La elección de la modalidad de evaluación global corresponde a los estudiantes, que podrán llevarla a cabo durante el primer cuarto del semestre (o hasta el último día del periodo de ampliación de matrícula si esta acaba después de ese periodo), a través de un espacio específico creado para ello en el Campus virtual. En caso de ausencia de solicitud expresa por parte del estudiante, la modalidad asignada será la de evaluación continua.

Con objeto de poder evaluar las competencias específicas CE18, CE20 y CE21, la asistencia al laboratorio para la realización de los trabajos experimentales propuestos será OBLIGATORIA.

### CONVOCATORIA ORDINARIA

#### **OPCIÓN 1. EVALUACIÓN GLOBAL (100%)**

Mediante una prueba escrita (cuya fecha fija la Junta de Facultad) se valorará el conocimiento de los contenidos teóricos y de resolución de problemas de la asignatura (75%). Además, en el examen se incluirán las prácticas de laboratorio (25%).

#### **OPCIÓN 2. EVALUACIÓN CONTINUA (100%).** Constará de:

##### \* EXAMEN DE LOS CONTENIDOS TEÓRICOS (60%)

Se realizarán dos exámenes parciales, uno de los temas 1-6 y otro de los temas 7-10. Cada examen constará de varias preguntas que se valorarán de 0 a 10. En el caso de que una pregunta tenga apartados, se especificará la calificación máxima de cada apartado. En otro caso, se considerará que los apartados tienen el mismo peso. Para aprobar por evaluación continua se debe obtener al menos un 5,0 en cada uno de ellos.



##### \* TRABAJOS EXPERIMENTALES (no recuperables) (15%)

Una vez realizados los trabajos experimentales, deberá presentarse un informe donde se recojan los resultados obtenidos. Los criterios de evaluación que se aplicarán para la corrección irán en función del error experimental cometido. El resultado debe ser expresado con el número correcto de cifras significativas (una sola cifra significativa incierta), junto con la precisión (95% probabilidad). Aquellos alumnos con una nota inferior a 4 en la evaluación de estas prácticas tendrán que realizar un examen práctico.

##### \* TAREAS PROPUESTAS (no recuperables) (25%)

Otros aspectos que formarán parte de la evaluación durante el curso serán:

- Una exposición oral, en clase, de un trabajo científico.
- Tareas relacionadas con los Temas 1-6.

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX		 Facultad de Ciencias
	Curso académico: 2024-25	Código: P/CL009_FC_D002	

- Ejercicios relacionados con los Temas 7-10 a través de la plataforma DOCTUS.

### CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA

En esta convocatoria se realizará un examen de los contenidos teóricos y prácticos de la asignatura en la fecha fijada por la Junta de Facultad.

#### Bibliografía (básica y complementaria)

##### Bloque I: Métodos cinéticos

- 1. Fundamentos de Química Analítica**, D. A. Skoog, D.M. West, F.J. Holler y S. R. Crouch, Ed. Cengage Learning, 10ª edición, 2024)
- 2. Análisis Químico de Trazas**, Carmen Cámara, Concepción Pérez-Conde (Eds.), Ed. Síntesis, 2011 (Comprende contenidos de los Bloques I, II y III)

##### Bloque II: Automatización

- 3. Automatización y miniaturización en Química Analítica**, M. Valcárcel y M.S. Cárdenas, Ed. Springer, 2000
- 4. Introducción a los métodos de análisis en flujo**, V. Cerdá Martín, Ed. Sciware, S. L., 2006

##### Bloque III: Quimiometría

- 5. Estadística y Quimiometría para Química Analítica**, J.N. Miller y J.C. Miller, Ed. Prentice Hall, 4ª edición, 2002 (Ed. Pearson Education, 7ª edición en inglés, 2018)
- 6. Quimiometría**, Guillermo Ramis Ramos y Mª Celia García Álvarez-Coque, Ed. Síntesis, 2001
- 7. Temas avanzados de Quimiometría**, M. Blanco y V. Cerdá (Eds.), Ed. Universitat de les Illes Balears. Servei de Publicacions i Intercanvi Científic, 2007

##### Bloque IV: Sensores



- 8. Principles of Chemical Sensors**, J. Janata, Ed. Springer Science, 2ª Edición, 2010

#### Otros recursos y materiales docentes complementarios

##### *Documentación Complementaria Bloque I*

- 1.- An automatic grading system for a laboratory experiment class. Kinetic determination of furfural as a parameter of food quality, M. I. Rodríguez-



	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX		 Facultad de Ciencias
	Curso académico: 2024-25	Código: P/CL009_FC_D002	

Cáceres, N. Mora-Díaz, M.P. Godoy-Caballero, D. Muñoz de la Peña, D. González-Gómez y A. Muñoz de la Peña, *Chemical Educator*, 14, 148-152 (2014).

### ***Documentación Complementaria Bloque II***

2.- Automatic internet-based grading system: Application in an instrumental analysis laboratory exercise at the chemistry grade, A. Muñoz de la Peña, D. González-Gómez, M. Sánchez Sequedo, D. Muñoz de la Peña, F. Gómez-Estern, *Journal of Chemical Education*, 90, 308-314 (2013).

### ***Documentación Complementaria Bloque III***

3.- Automatic evaluation and data generation for analytical chemistry instrumental analysis exercises, A. Muñoz de la Peña, D. Muñoz de la Peña, M. P. Godoy-Caballero, D. González-Gómez, F. Gómez-Estern, C. Sánchez, *Química Nova*, 37, 1550-1558 (2014).



4.- Spectrophotometric Analysis of Mixtures by Classical Least-Squares Calibration: An Advanced Experiment Introducing MATLAB, D. González Gómez, A. Muñoz de la Peña, A. Espinosa Mansilla, A. C. Olivieri, *Chemical Educator*, 8, 187-191 (2003).

5.- Evaluación automática de un test de comparación de las pendientes de dos rectas de calibrado en ejercicios numéricos y prácticas de laboratorio mediante DOCTUS, O. Monago Maraña, E. Martín Tornero, T. Galeano Díaz, D. Muñoz de la Peña, A. Muñoz de la Peña, *Actualidad Analítica*, 65, 19-22 (2019).

6.- New alternatives to academic delivery. Implementation of analytical chemistry quality assessment exercises in an e-learning environment, D. Airado-Rodríguez, D. Muñoz de la Peña, I. Durán-Merás, J. Domínguez Manzano, A. Muñoz de la Peña, *Journal of Chemical Education*, 99, 3424-3434 (2022).

### ***Documentación Complementaria Bloque IV***

7.- Photoinduced electron transfer fluorimetric Hg(II) chemosensor based on a BODIPY tetrapod derivative, J. M. Culzoni, A. Muñoz de la Peña, A. Machuca, H. C. Goicoechea, R. Brasca, R. Babiano, *Talanta*, 117, 288-296 (2013).

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		 Facultad de Ciencias
	Curso académico: 2024-25	Código: P/CL009_FC_D002	

8.- Sensing nanofibre mat produced by electrospinning for turn-on luminescence determination of Hg<sup>2+</sup> in water samples, F. J. Orriach-Fernández, A. L. Medina-Castillo, J. E. Díaz-Gómez, A. Muñoz de la Peña, J. F. Fernández-Sánchez, A. Fernández-Gutiérrez, Sensors and Actuators B, 195, 8-14 (2014).

### RECOMENDACIONES

**Se recomienda** la asistencia continuada a las clases teóricas y la participación activa en las mismas

**Se recomienda** haber cursado las asignaturas de Análisis Instrumental y Técnicas Analíticas de Separación e Hibridación Instrumental

**Se recomienda** la resolución de las relaciones de problemas que se proponen para trabajo en casa por parte del alumno, antes de la impartición de los Seminarios de Problemas

**Es obligatoria** la asistencia y realización de los trabajos prácticos en el laboratorio

**Se recomienda** la utilización de la Página Web de la asignatura en el Campus Virtual: <http://campusvirtual.unex.es>, en la cual se proporcionan al alumno las presentaciones de los temas, antes de las sesiones de clases teóricas, así como las relaciones de problemas a resolver y los guiones de prácticas de laboratorio.