



QUIMIOMETRIA AVANZADA

CARRERA: LICENCIATURA EN CIENCIAS MENCION QUIMICA

I. IDENTIFICACIÓN

1.	Código	:	32Q
2.	Horas Semanales de Clase	:	4
	2.1. Teóricas	:	2
	2.2. Prácticas	:	2
3.	Crédito	:	3
4.	Pre-Requisito	:	Ninguno

II. JUSTIFICACIÓN

La química pura implica un conocimiento sólido en matemáticas, física y química. La quimiometría es la medición de la química, que utiliza las relaciones interdisciplinarias existentes entre estas tres ciencias, para garantizar que el análisis cuantitativo dentro de un ensayo brinde calidad y confianza en los resultados de la medición de cualquier analito de interés. El dominio escrito de una metodología no es suficiente en un ensayo, sino además habría que diseñarlo muchas veces, interpretarlo y hasta a veces corregirlo. La importancia de esta materia electiva es porque ella lleva a la química, física y a las matemáticas en un único ensamble al campo aplicado, específicamente al análisis químico, logrando de esta manera confianza y garantía de calidad sobre los resultados emitidos por un químico ya sea en un análisis de rutina o de investigación.

Quimiometría Avanzada (medición de la química avanzada) otorgará al alumno destreza y dominio sobre técnicas analíticas, diseñará un método analítico según la demanda utilizando la estadística y la química pura como herramientas de soporte en los diseños y ejecución de metodologías analíticas. Además aprenderá a interpretar los resultados obtenidos en el análisis, con el fin de elaborar informes técnicos utilizando normas vigentes o exigidas por un cliente en situaciones simuladas para llevarlo y aplicarlo correctamente al campo laboral o la investigación

III. OBJETIVO

1. Aplicar los conceptos fundamentales de la química a los análisis de laboratorio.
2. Diferenciar tipos de matrices para previos tratamientos en análisis químico.
3. Utilizar las aplicaciones de la matemática en los análisis de laboratorio para resolver problemas analíticos y garantizar la calidad de ensayos dentro del análisis.
4. Diseñar metodologías analíticas utilizando como soporte a la química pura y a las matemáticas.
5. Interpretar resultados analíticos utilizando soporte científico para formular conclusiones.



IV. CONTENIDO

A. UNIDADES PROGRAMATICAS

1. Introducción a la Quimiometría
2. Tratamiento previo de matrices orgánicas e inorgánicas para posteriores ensayos químicos.
3. Aplicaciones de la volumetría en análisis químico
4. Aplicaciones de la gravimetría en análisis químico.
5. Métodos potenciométricos aplicados al análisis químico
6. Aplicaciones de la Espectrofotometría de absorción, Molecular ultravioleta/visible (EAM – Uv/V) al análisis químico.
7. Aplicaciones de la cromatografía de líquidos de alta eficiencia (HPLC) y de gases (GC) en el análisis químico
8. Aplicaciones de la espectrofotometría de absorción atómica, (EAA) en el análisis químico
9. Métodos cinéticos aplicados al análisis químico
10. Interpretación y análisis de los resultados obtenidos de los diferentes métodos analíticos.
11. Aplicación de la Estadística al análisis Químico y al control de calidad.
12. La calidad en los laboratorios de Análisis.
13. La Química Pura como herramienta en el Desarrollo Analítico
14. Validación de Métodos
15. Elaboración de informes técnicos con utilización de formatos incluidos rangos de referencia exigida por normas paraguayas o internacionales

B. DESARROLLO DE LAS UNIDADES PROGRAMATICAS

1. Introducción a la Quimiometría
 - 1.1. Quimiometría: concepto, origen y tendencias.
 - 1.2. La quimiometría en las diferentes etapas del proceso analítico.
 - 1.3. Clasificación de las técnicas quimiométricas.
 - 1.4. Campos de aplicación.
2. Tratamiento previo de matrices orgánicas e inorgánicas para posteriores ensayos químicos.
 - 2.1. Destrucción de matrices orgánicas por vía húmeda.
 - 2.2. Destrucción de materia orgánica por calcinación
 - 2.3. Eliminación de interferencias en matrices inorgánicas y orgánicas para posteriores ensayos del analito de interés.
3. Aplicaciones de la volumetría en análisis químico
 - 3.1. Tratamiento y preparación de muestras para su análisis según métodos Standard.
 - 3.2. Interpretación de las reacciones químicas implicadas en el ensayo volumétrico.
 - 3.3. Cuantificación e interpretación de los resultados obtenidos.



UNIVERSIDAD NACIONAL DE ASUNCIÓN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
DEPARTAMENTO DE QUIMICA

PLAN 2001

4. Aplicaciones de la gravimetría en análisis químico.
 - 4.1. Tratamiento y preparación de muestras para su análisis según métodos Standard.
 - 4.2. Interpretación de los pasos seguidos durante el análisis gravimétrico.
 - 4.3. Cuantificación e interpretación de los resultados obtenidos.

5. Métodos potenciométricos aplicados al análisis químico
 - 5.1. Tratamiento y preparación de muestras para su análisis según métodos Standard.
 - 5.2. Interpretación de los pasos seguidos durante el análisis potenciométrico
 - 5.3. Cuantificación e interpretación de los resultados obtenidos.

6. Aplicaciones de la Espectrofotometría de absorción, Molecular ultravioleta/visible (EAM – Uv/V) al análisis químico.
 - 6.1. Tratamiento y preparación de muestras para su análisis según métodos Standard
 - 6.2. Interpretación de los espectros obtenidos a través de la EAM-Uv/V.
 - 6.3. Cuantificación de principios activos en diferentes matrices utilizando métodos de EAM-Uv/V

7. Aplicaciones de la cromatografía de líquidos de alta eficiencia (HPLC) y de gases (GC) en el análisis químico
 - 7.1. Tratamiento y preparación de muestras para su análisis según métodos Standard
 - 7.2. Interpretación de los espectros obtenidos a través de HPLC y GC
 - 7.3. Cuantificación de principios activos en diferentes matrices utilizando métodos de HPLC y GC.
 - 7.4. Identificación y aislamiento de principios activos en fármacos por TLC
 - 7.5. Interpretación de los resultados y obtención de valores semicuantitativos utilizando éste método.

8. Aplicaciones de la espectrofotometría de absorción atómica, (EAA) en el análisis químico
 - 8.1. Tratamiento y preparación de muestras para su análisis según métodos Standard.
 - 8.2. Interpretación de los espectros obtenidos a través de EAA
 - 8.3. Cuantificación de principios activos en diferentes matrices utilizando métodos de EAA

9. Métodos cinéticos aplicados al análisis químico
 - 9.1. Tratamiento y preparación de muestras para su análisis según métodos Standard.
 - 9.2. Interpretación de los espectros obtenidos a través de EAM-Uv/V
 - 9.3. Cuantificación de principios activos en diferentes matrices utilizando métodos de EAM-Uv/V



UNIVERSIDAD NACIONAL DE ASUNCIÓN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
DEPARTAMENTO DE QUIMICA

PLAN 2001

10. Interpretación y análisis de los resultados obtenidos de los diferentes métodos analíticos.
 - 10.1. Calificación y cuantificación de un compuesto químico utilizando métodos químicos multidisciplinarios.
 - 10.2. Cálculos, interpretación y análisis profundo de los resultados.

11. Aplicación de la Estadística al análisis Químico y al control de calidad.
 - 11.1. Introducción a los ensayos de significación.
 - 11.2. Distribución normal, otras distribuciones.
 - 11.3. Pruebas de significación paramétricas (la prueba t, prueba t por parejas, pruebas de una y dos colas, la prueba F)
 - 11.4. Análisis de la varianza (ANOVA)
 - 11.5. La prueba chi-cuadrado
 - 11.6. Pruebas de normalidad de una distribución normal
 - 11.7. Pruebas de significación no paramétricas (tes de U Mann-Whitney)
 - 11.8. Introducción al calibrado: calibración y proceso de medida
 - 11.9. Dependencia funcional entre dos variables
 - 11.10. Tipos de patrones utilizados en calibración. Patrones de referencia primarios y secundarios.
 - 11.11. Etapas básicas del proceso de calibración.
 - 11.12. Rango lineal, límites de detección y cuantificación.
 - 11.13. Corrección de errores en la calibración: blanco de Youden, adición de estándar, estándar interno.
 - 11.14. Mínimos cuadrados ponderados.

12. La calidad en los laboratorios de Análisis.
 - 12.1. Introducción a la calidad
 - 12.2. Muestreo y representatividad de muestras que aseguren los resultados del ensayo y la calidad
 - 12.3. Elementos básicos de la calidad: garantía de la calidad, control de la calidad y evaluación de la calidad
 - 12.4. Referencias normativas de los sistemas de la calidad (normalización, certificación, acreditación, BPLs)
 - 12.5. Documentos de los sistemas de la calidad
 - 12.6. Trazabilidad
 - 12.7. Incertidumbre

13. La Química Pura como herramienta en el Desarrollo Analítico
 - 13.1. Pruebas de solubilidad de especies químicas orgánicas e inorgánicas para el aislamiento de principios activos en una matriz de interés.
 - 13.2. Principios de absorción, adsorción, cinéticos, potenciométricos, etc., en el desarrollo de un método analítico.
 - 13.3. Utilización de los diferentes tipos de reacciones químicas para el diseño de un método analítico y su posterior cuantificación.



UNIVERSIDAD NACIONAL DE ASUNCIÓN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
DEPARTAMENTO DE QUIMICA

PLAN 2001

14. Validación de Métodos

- 14.1. Concepto de validación
- 14.2. Parámetros de validación en métodos cuantitativos.
- 14.3. Parámetros de validación en métodos cualitativos
- 14.4. Etapas de la validación

15. Elaboración de informes técnicos con utilización de formatos incluidos rangos de referencia exigida por normas paraguayas o internacionales

- 15.1. Diseño y elaboración de un certificado de análisis
- 15.2. Incluir observaciones y criterios sobre los resultados obtenidos utilizando sustentos científicos y bibliográficos modernos.

V. METODOLOGIA

- Exposición simple y asistida
- Practica de laboratorio
- Resolución de problemas
- Seminario
- Observación
- Investigación Bibliográfica

VI. MEDIOS AUXILIARES

- *Pizarrón*
- *Retroproyector*
- *Proyector de diapositivas*
- *Materiales bibliográficos*
- *Otros.*

VII. EVALUACIÓN

La evaluación se registrará conforme al reglamento de la FaCEN.

VIII. BIBLIOGRAFIA

BASICA

- Harvey Davud. Química Analítica Moderna. Editorial Mc. Graw Hill/Interamericana de España 2002.
- Compañó B. Ramón; Ríos C. Angel, Garantía de Calidad en los laboratorios analíticos.
- Harris Daniel C.; Análisis Químico Cuantitativo. Editorial Reverté S.A., 2º Edición correspondiente a la 5º edición original norteamericana. Barcelona – España 2001.
- Millar James N.; Millar Jane C.; Estadística y Quimiometría para Química Analítica. Editorial Prentice Hall 1999.



UNIVERSIDAD NACIONAL DE ASUNCIÓN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
DEPARTAMENTO DE QUIMICA

PLAN 2001

COMPLEMENTARIA

- Guiteras Jacinto, Rubio Roser, Fonrodona Gemma. Curso Experimental en Química Analítica. Editorial Síntesis S.A. Madrid-España. 2003.
- Flores A. Luis J; Sánchez E. Sergio, Uribe L Sonia. Manual de Prácticas Bioquímica. Editorial Mc Graw Hill/Interamericana de México D.F., 2005
- Skoog, West, Holler, Crouch. Fundamentos de Química Analítica (octava edición). Editorial Thomson de España, 2004
- Skoog, Holler, Nieman. Principios de Análisis Instrumental. (quinta edición) Editorial Mc Graw Hill/Interamericana de España, 2001
- Ruiz S. Juan J, Rodríguez M. José M, Muñoz G. Eulogia M., Sevilla S. José M. Curso Experimental en Química Física. Editorial Síntesis S.A. Madrid- España 2003
- Official Methods of Análisis of the Association of official Analytical Chemists. Printed in the United States of América. Fifteenth Edition 1990
- Farmacopea de los Estados Unidos de América, Formulario Nacional. Compendios de Normas Oficiales (USP-NF). Volúmenes 1,2, y 3. Primera Edición en España 2008.