



#### DATOS DE LA ASIGNATURA

**Denominación:** QUÍMICA SUPRAMOLECULAR, INMUNOENSAYO Y METABOLÓMICA EN QUÍMICA FINA

**Código:** 102337

**Plan de estudios:** MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA

**Curso:** 1

**Denominación del módulo al que pertenece:**

**Materia:**

**Carácter:**

**Duración:**

**Créditos ECTS:** 4

**Horas de trabajo presencial:** 40

**Porcentaje de presencialidad:** 40%

**Horas de trabajo no presencial:** 60

**Plataforma virtual:** Moodle

#### DATOS DEL PROFESORADO

**Nombre:** GOMEZ HENS, AGUSTINA

**Departamento:** QUÍMICA ANALÍTICA

**Área:** QUÍMICA ANALÍTICA

**Ubicación del despacho:** Anexo Edificio Marie Curie

**e-Mail:** qa1gohea@uco.es

**Teléfono:** 957-218645

**Nombre:** LUQUE DE CASTRO, MARIA DOLORES

**Departamento:** QUÍMICA ANALÍTICA

**Área:** QUÍMICA ANALÍTICA

**Ubicación del despacho:** Anexo Edificio Marie Curie

**e-Mail:** qa1lucam@uco.es **Teléfono:** 957218615

**Nombre:** RUBIO BRAVO, SOLEDAD

**Departamento:** QUÍMICA ANALÍTICA

**Área:** QUÍMICA ANALÍTICA

**Ubicación del despacho:** Anexo Edificio Marie Curie

**e-Mail:** qa1rubrs@uco.es **Teléfono:** 957218644

#### DATOS ESPECÍFICOS DE LA ASIGNATURA

##### REQUISITOS Y RECOMENDACIONES

##### Requisitos previos establecidos en el plan de estudios

Ninguno.

##### Recomendaciones

Ninguna especificada.

#### COMPETENCIAS

CB6 Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación

CB10	Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
CT2	Que el estudiante sepa utilizar herramientas de información y comunicación que permitan plantear y resolver problemas nuevos dentro de contextos relacionados con su área de estudio.
CE4	Seleccionar la instrumentación química y recursos informáticos adecuados para el estudio a realizar y aplicar sus conocimientos para utilizarla de manera correcta.

## OBJETIVOS

Se pretende que al finalizar el proceso de enseñanza-aprendizaje, el estudiante sea capaz de:

- Aplicar los sistemas supramoleculares en procesos analíticos de interés en Química Fina para la mejora de las propiedades y características de los mismos.
- Aplicar los conocimientos adquiridos sobre las características y versatilidad de las distintas técnicas de inmunoensayo a la resolución de problemas analíticos relacionados con las distintas áreas de la Química Fina.
- Aplicar los conocimientos adquiridos al estudio de las rutas metabólicas que, por ellas mismas o con auxilio de otras ómicas, permitan aclarar comportamientos anormales en vegetales y/o en animales, incluyendo el área clínica; lo que en último término constituirán aportaciones a la Química Fina.

## CONTENIDOS

### 1. Contenidos teóricos

**Lección 1.** Introducción a la química analítica supramolecular. Autoensamblaje y reconocimiento supramolecular. Agregados supramoleculares: tipos, estructuras y propiedades. Solubilización y propiedades de compuestos químicos en sistemas supramoleculares.

**Lección 2.** Sistemas supramoleculares en procesos de extracción analítica. *Disolventes supramoleculares:* síntesis, propiedades, formatos, compatibilidad con técnicas de separación y detección y aplicaciones. *Adsorbentes supramoleculares:* isothermas de adsorción, propiedades, formatos, compatibilidad con técnicas de separación y detección y aplicaciones.

**Lección 3.** Sistemas supramoleculares en técnicas cromatográficas y electroforéticas. *Cromatografía quiral, cromatografía líquida micelar, electroforesis capilar quiral y cromatografía micelar electrocinética:* sistemas supramoleculares utilizados, formatos, propiedades, compatibilidad con sistemas de detección y aplicaciones.

**Lección 4.** Introducción al inmunoensayo. Inmunorreactivos: anticuerpos y marcadores. Fundamento. Formatos homogéneos y heterogéneos.

**Lección 5.** Tipos de inmunoensayos. Enzimoimmunoensayo. Fluorinmunoensayo. Inmunoensayo quimioluminiscente. Inmunoensayo y nanotecnología. Inmunoensayos multianalitos.

**Lección 6.** Inmunosensores: Fundamento y tipos. Técnicas de inmunoafinidad: inmunoextracción y cromatografía de inmunoafinidad.

**Lección 7.** Introducción a la metabolómica. Generalidades. Subdisciplinas de la metabolómica: Clasificación. Estrategias analíticas usadas en metabolómica. La metabolómica en el contexto de las disciplinas ómicas: La biología de sistemas.

**Lección 8.** Parte 1: Las herramientas analíticas de la metabolómica. Introducción. Selección de la muestra. Preparación de la muestra. Técnicas de análisis sin separación previa (espectroscopía de resonancia magnética nuclear, espectrometría de masas, espectroscopía de infrarrojo). Técnicas de análisis con separación previa (cromatografía de gases, cromatografía de líquidos y electroforesis capilar). Parte 2: La quimiometría y la bioinformática en metabolómica. Introducción. Modelado y análisis de datos: La combinación del diseño de experimentos y el análisis multivariante. Herramientas quimiométricas características de la metabolómica. Bases de datos.

**Lección 9.** Parte 1: Metabolómica clínica. Introducción. La aplicación de la metabolómica en estudios clínicos. Farmacometabolómica. Nutrimetabolómica. Lipidómica. Biomarcadores. Parte 2: Metabolómica vegetal. Aspectos históricos y genéricos de la metabolómica vegetal. Limitaciones de la disciplina. Huellas y perfiles metabolómicos de vegetales. Ejemplos.

## 2. Contenidos prácticos

Se realizarán seminarios en los que se discutirán cuestiones relacionadas con los contenidos teóricos

### METODOLOGÍA

#### Actividades presenciales

Actividad	Grupo completo	Grupo mediano	Total
<i>Lección magistral</i>	30	-	30
<i>Seminario</i>	10	-	10
<b>Total horas:</b>	40	-	40

#### Actividades no presenciales

Actividad	Total
<i>Búsqueda de información</i>	5
<i>Consultas bibliográficas</i>	5
<i>Ejercicios</i>	10
<i>Estudio</i>	40
<b>Total horas:</b>	60

### MATERIAL DE TRABAJO PARA EL ALUMNADO

Dossier de documentación  
Ejercicios y problemas

## EVALUACIÓN

Competencias	Instrumentos		
	Exposiciones	Pruebas de respuesta corta	Resolución de problemas
CB10			
CB6			
CE4			
CT2			
<b>Total (100%)</b>	10%	75%	15%
<b>Nota min.(*)</b>	-	-	-

(\*) Nota mínima necesaria para el cálculo de la media

**Periodo de validez de las calificaciones parciales:** *Durante el curso académico correspondiente*

**Aclaraciones generales sobre la evaluación y adaptaciones metodológicas para los alumnos a tiempo parcial:**

La evaluación del alumno a tiempo parcial se realizará de acuerdo con la normativa del centro y considerando las características de cada caso

**Valor de la asistencia en la calificación final:**

**Criterios de calificación para la obtención de MATRICULA DE HONOR:**

## BIBLIOGRAFÍA

### 1. Bibliografía básica:

- J.W. Steed, D.R. Turner, K.J. Wallace. Core concepts in supramolecular chemistry and nanochemistry, John Wiley and Sons, Chichester, 2007.
- J.A. Pelesko, Self assembly: the science of things that put themselves together. Chapman and Hall, London, 2007.
- K. Ariga, T. Kunitake, Supramolecular Chemistry: Fundamentals and applications. Springer, Heidelberg, 2006.
- F. Merino, S. Rubio, D. Pérez-Bendito. Supramolecular systems-based extraction-separation techniques coupled to mass spectrometry. J. Sep. Sci. 2005, 28, 1613-1627.
- S. Rubio, D. Pérez-Bendito, Supramolecular assemblies for extracting organic compounds, Trends Anal. Chem. 2003, 22, 470-485.
- A. Ballesteros-Gómez, M.D. Sicilia, S. Rubio. Supramolecular solvents in the extraction of organic compounds. A review. Anal. Chim. Acta, 2010, 677, 108-130.
- M.P. Marco, S. Gee, B.D. Hammock. Immunochemical techniques for environmental analysis II. Antibody production and immunoassay development. Trends Anal. Chem. 1995, 14, 415-425.
- G. Silva-Nunes, I.A. Toscano, D. Barceló. Analysis of pesticides in food and environmental samples by

enzyme-linked immunosorbent assays. Trends Anal. Chem. 1998, 17, 79-87.

- M.A. Gonzalez-Martinez, R. Puchades, A. Maquieira. Online immunoanalysis for environmental pollutants: from batch assays to automated sensors. Trends Anal. Chem. 1999, 18, 204-218.

- M.G. Weller. Immunochromatographic techniques, a critical review. Fresenius J. Anal. Chem. 2000, 366, 635-645.

- Z. Tang, T. Karnes. Coupling immunoassays with chromatographic separation techniques. Biomed. Chromat. 2000, 14, 442-449.

- F. Ricci, G. Adornetto, G. Palleschi. A review of experimental aspects of electrochemical immunosensors. Electrochem. Acta, 84, 2012, 74-83.

- T.R.J. Holford, F. Davis, S.P.J. Seamus. Recent trends in antibody based sensors. Biosens. Bioelect., 34, 2012, 12-24.

- Álvarez-Sánchez B, Priego-Capote F, Luque de Castro MD (2010): Metabolomics analysis. (I) Selection of biological samples and practical aspects preceding sample preparation. (II) Preparation of biological samples prior to detection. Trends Anal Chem 20: 111&ndash;127.

- Calderón-Santiago M, Priego-Capote F, Galache-Osuna JG, Luque de Castro MD (2012): Determination of essential amino acids in human serum by a targeting method based on automated SPE&ndash;LC&ndash;MS/MS: discrimination between arteriosclerotic patients. J Pharm Biomed Anal 70: 476&ndash;484.

- Ferreira-Vera C, Mata-Granados JM, Priego-Capote F, Luque de Castro MD (2013): Short-term comparative study of the influence of fried edible oils intake on the metabolism of essential fatty acids in obese individuals. Food Chem 136: 576&ndash;584.

- GriffithsWJ (Editor) (2008): Metabolomics, Metabonomics and Metabolite Profiling. Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK.

- Lindon JC, Nicholson JK, Holmes E (2007): The Handbook of Metabonomics and Metabolomics. Elsevier, Amsterdam.

- Luque de Castro MD (2011): Cosmetobolomics as an incipient "-omics" with high analytical involvement. Trends Anal Chem 30: 1365&ndash;1371.

## 2. Bibliografía complementaria:

Ninguna.

### CRITERIOS DE COORDINACIÓN

Ningún criterio introducido.