

II Curso de divulgación

Los avances de la Química y su impacto en la sociedad"

Instituto de Química Orgánica General. CSIC. Madrid, Sep. 2010 - Feb. 2011

EL IMPACTO SOCIAL DE LA INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA DE CALIDAD

21 de octubre de 2010



Miguel Valcárcel
Eva Aguilera
Universidad de Córdoba

El impacto social de la información (bio)química de calidad

CONTEXTUALIZACIÓN

LA QUÍMICA ANALÍTICA, HOY Y MAÑANA

LA SECUENCIA DATOS-INFORMACIÓN-CONOCIMIENTO

LA INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA)

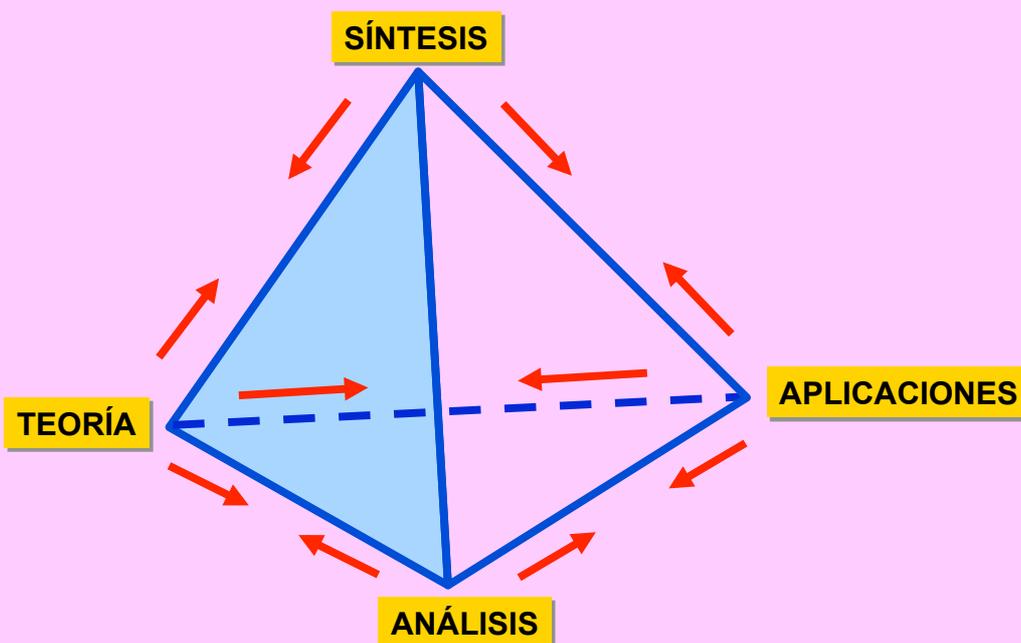
LA CALIDAD DE LA INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA

R E T O S

CONTEXTUALIZACIÓN

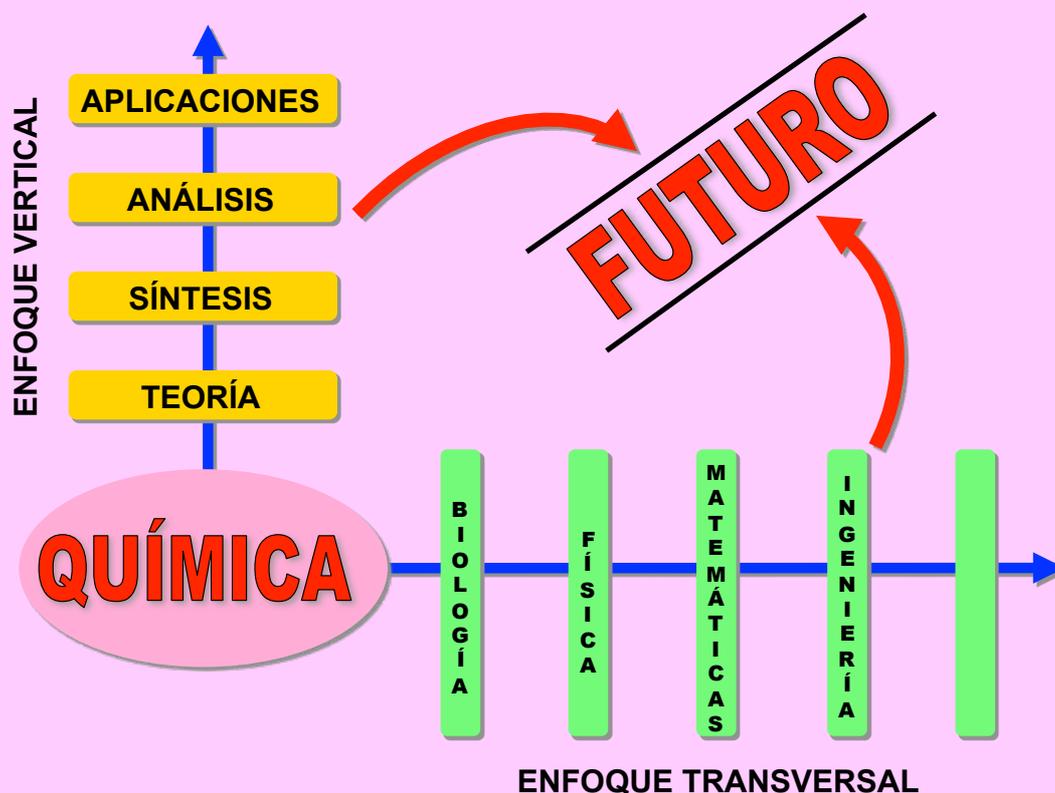
LA QUÍMICA HOY Y MAÑANA

ELEMENTOS ESENCIALES DE LA QUÍMICA



EL DOBLE ENFOQUE DE LA QUÍMICA ACTUAL

INTERFASES INTERNAS (VERTICALES) Y EXTERNAS (TRANSVERSALES)



RETOS DE LA QUÍMICA HOY Y MAÑANA



Resolución de la Asamblea General de la ONU

2011 International Year of Chemistry

Colaboran:

- IUPAC
- American Chemical Society (USA)
- National Academy of Science (USA)
- Federation of European Chemical Societies
- Federation of African Societies of Chemistry
- Otros organismos: Nacionales
Internacionales

LA ASIGNATURA PENDIENTE DE DIVULGAR EL PAPEL REAL DE LA QUÍMICA EN LA SOCIEDAD

**LA DIVULGACIÓN DEBE CONSIDERARSE PRIORITARIA
Y ESTRATÉGICA PARA DOCENTES, INVESTIGADORES
Y PROFESIONALES DE LA QUÍMICA.**

THE PUBLIC IMAGE OF CHEMISTRY

J. Schumer, B. Bensaude-Vicent, B. van Tiggelen

360 páginas

World Scientific, London, 2007

COMUNICAR LA CIENCIA

Fundación COTEC, Madrid, 2008

(distribución gratuita: Solicitar en angeles.diaz@cotec.es)

CONNOTACIONES **NEGATIVAS** DE LA QUÍMICA EN LA SOCIEDAD

■ **MANIPULACIÓN / ARTIFICIALIDAD**

“Este vino tiene mucha química”

■ **CONTAMINACIÓN**

“Estas aguas están contaminadas por los desechos químicos de industrias del entorno”

■ **TOXICIDAD**

“Los monómeros residuales de este envase de plástico han pasado al alimento que contiene”

■ **DROGADICCIÓN**

- *“Esta nueva molécula sintética logra pasar inadvertida en los controles antidoping”*
- *“Esta molécula inocua impide la detección de drogas por las técnicas establecidas por la Comisión Médica del COI”*

CONNOTACIONES **POSITIVAS** DE LA QUÍMICA EN LA SOCIEDAD

AFINIDAD QUÍMICA



CONCEPTO CIENTÍFICO

EMPLEO SOCIAL

**RELACIÓN FAVORABLE
DE ENTENDIMIENTO
ENTRE PERSONAS**

SE DICE . . .

“HAY MUCHA QUÍMICA ENTRE PERSONAS”
“HAY BUENA QUÍMICA ENTRE PERSONAS”

LA DOBLE FACETA DE LA QUÍMICA EN EL DEPORTE



IMPACTO DE LA QUÍMICA (CIENCIAS DE LOS MATERIALES) EN EL LEMA OLÍMPICO “Citius, Altius, Fortius” (*)

POLÍMEROS
ELASTÓMEROS
FIBRAS DE CARBONO
COMPOSITES
NANO-COMPOSITES
-
-
-

PROPORCIONAR NUEVAS
HERRAMIENTAS DEPORTIVAS
QUE POTENCIEN LA
PULVERIZACIÓN DE MARCAS QUE
SIN LA INNOVACIÓN QUÍMICA
SERÍAN IMPENSABLES



NUEVAS DROGAS SINTÉTICAS QUE PRETENDEN PASAR INADVERTIDAS EN LOS CONTROLES RUTINARIOS ANTI-DOPING DE LA COMISIÓN MÉDICA DEL COI

(*) LA QUÍMICA SIEMPRE PRESENTE EN EL DEPORTE
Química e Industria, septiembre 2008, 15-26

EVOLUCIÓN DE LOS ESTUDIANTES DE INGRESO EN LOS ESTUDIOS DE QUÍMICA

PROBLEMÁTICA MUNDIAL

DESCENSO DE LAS “VOCACIONES” QUÍMICAS POR SU “MALA IMAGEN”



FACULTADES Y DEPARTAMENTOS DE QUÍMICA FORÁNEOS INCLUSO HAN CAMBIADO SU DENOMINACIÓN

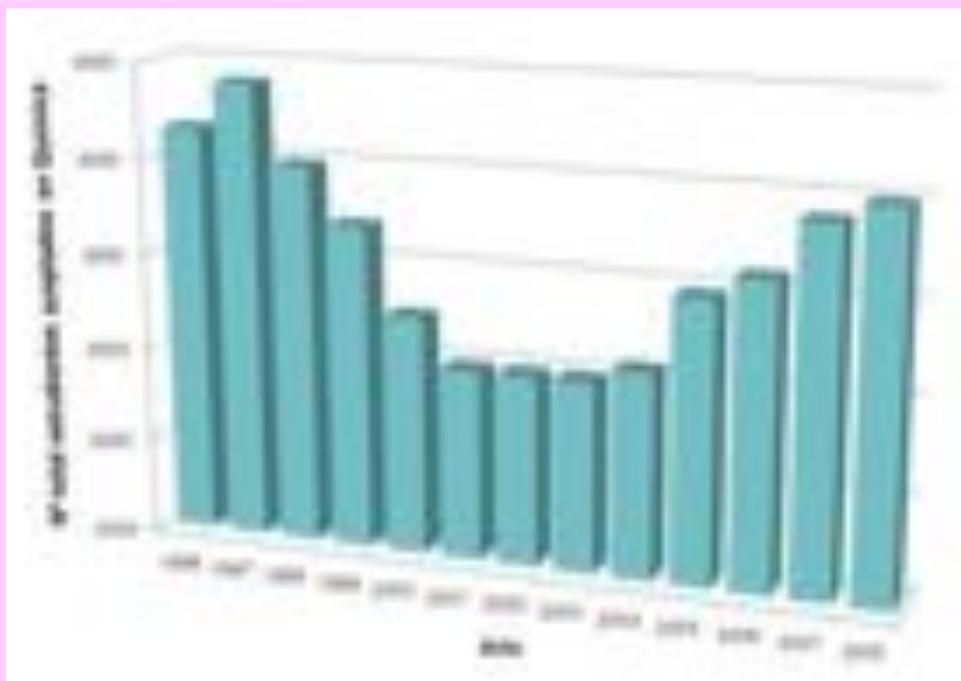
PROBLEMÁTICA ESPAÑOLA

- DESCENSO CRECIENTE DEL NÚMERO DE ALUMNOS DE PRIMERA MATRÍCULA
- MUCHOS ESTUDIANTES DE QUÍMICA NO LA ELIGIERON COMO PRIMERA OPCIÓN ⇨ “COCHE ESCOBA” DE OTRAS TITULACIONES

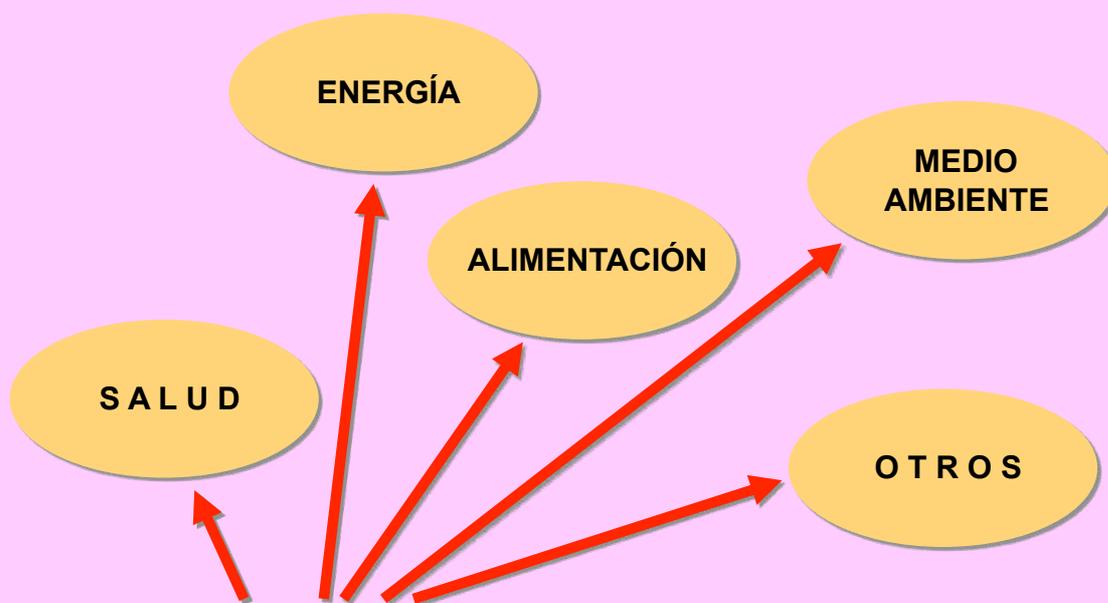
EVOLUCIÓN DE LA SITUACIÓN

- HACE TRES AÑOS EL DESCENSO EMPEZÓ A ESTABILIZARSE (“plateau”)
- RECIENTEMENTE HA EMPEZADO EL CRECIMIENTO.
- INFORME INFOEMPLO (octubre 2008): LA LICENCIATURA DE QUÍMICA ENTRE LAS 20 TITULACIONES MÁS DEMANDADAS POR LOS EMPLEADORES.

EVOLUCIÓN DE LOS ESTUDIANTES DE INGRESO EN GRAN BRETAÑA



RETOS DE LA HUMANIDAD



LA **QUÍMICA** JUEGA Y PUEDE JUGAR UN PAPEL TRANSCENDENTAL EN CADA UNO DE ELLOS

LA QUÍMICA ANALÍTICA HOY Y MAÑANA

DEFINICIÓN

FINES Y OBJETIVOS

REFERENCIAS
BÁSICAS

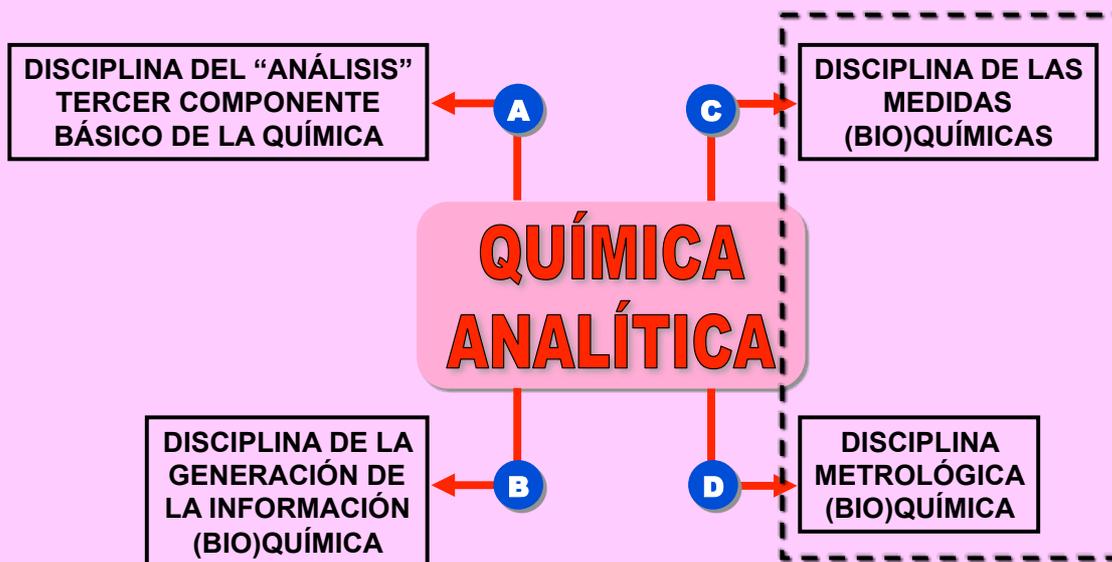
FUNDAMENTOS PROPIOS
Y COMPARTIDOS

PRODUCTOS
DE I+D+I

INDICADORES
DE CALIDAD

LA QUÍMICA ANALÍTICA HOY Y MAÑANA

DEFINICIÓN (1)



LA QUÍMICA ANALÍTICA HOY Y MAÑANA

DEFINICIÓN (2)

LA QUÍMICA ANALÍTICA ES UNA DISCIPLINA **METROLÓGICA** QUE DESARROLLA, OPTIMIZA Y APLICA **PROCESOS DE MEDIDA** ENCAMINADOS A OBTENER **INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA DE CALIDAD** DE OBJETOS Y SISTEMAS NATURALES Y/O ARTIFICIALES PARA SATISFACER LAS **NECESIDADES INFORMATIVAS** Y CONTRIBUIR A LA **TOMA DE DECISIONES CORRECTA Y A TIEMPO** EN ÁMBITOS CIENTÍFICOS, TÉCNICOS, ECONÓMICOS Y SOCIALES.

LA QUÍMICA ANALÍTICA HOY Y MAÑANA

FINES Y OBJETIVOS (1)

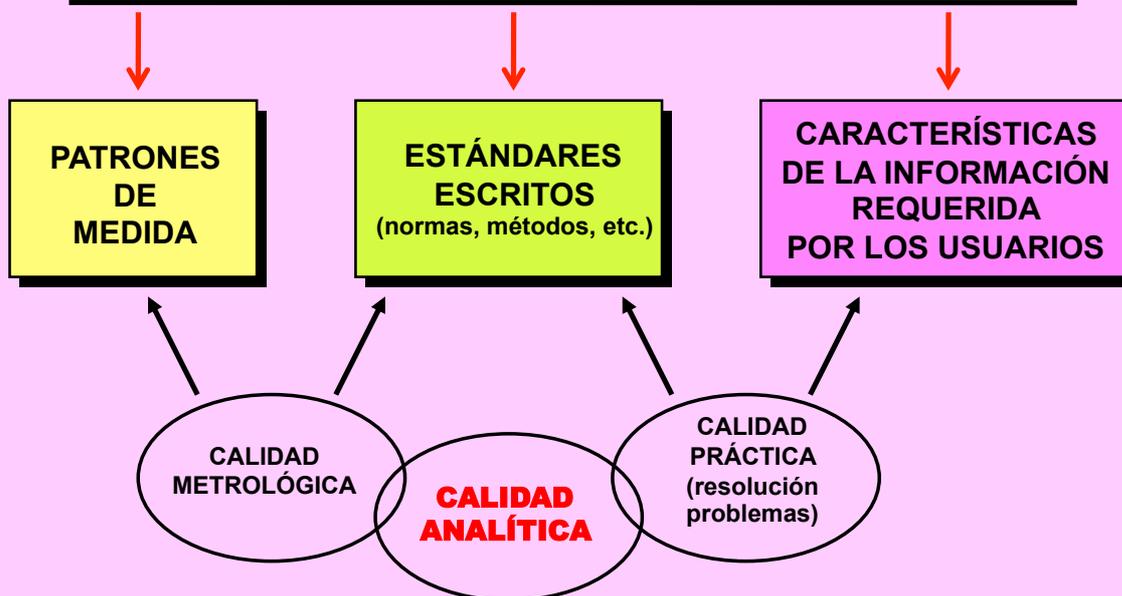


QUÍMICA ANALÍTICA



LA QUÍMICA ANALÍTICA HOY Y MAÑANA

REFERENCIAS QUÍMICO-ANALÍTICAS BÁSICAS



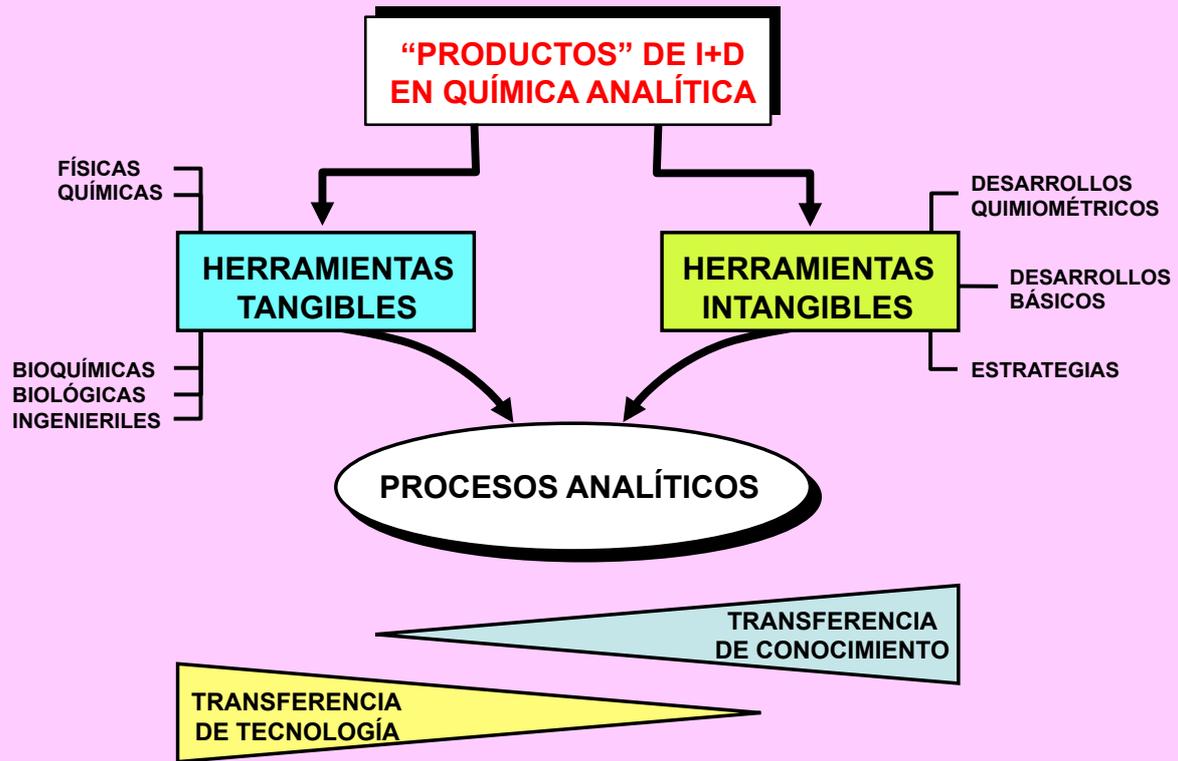
LA QUÍMICA ANALÍTICA HOY Y MAÑANA

FUNDAMENTOS PROPIOS Y COMPARTIDOS



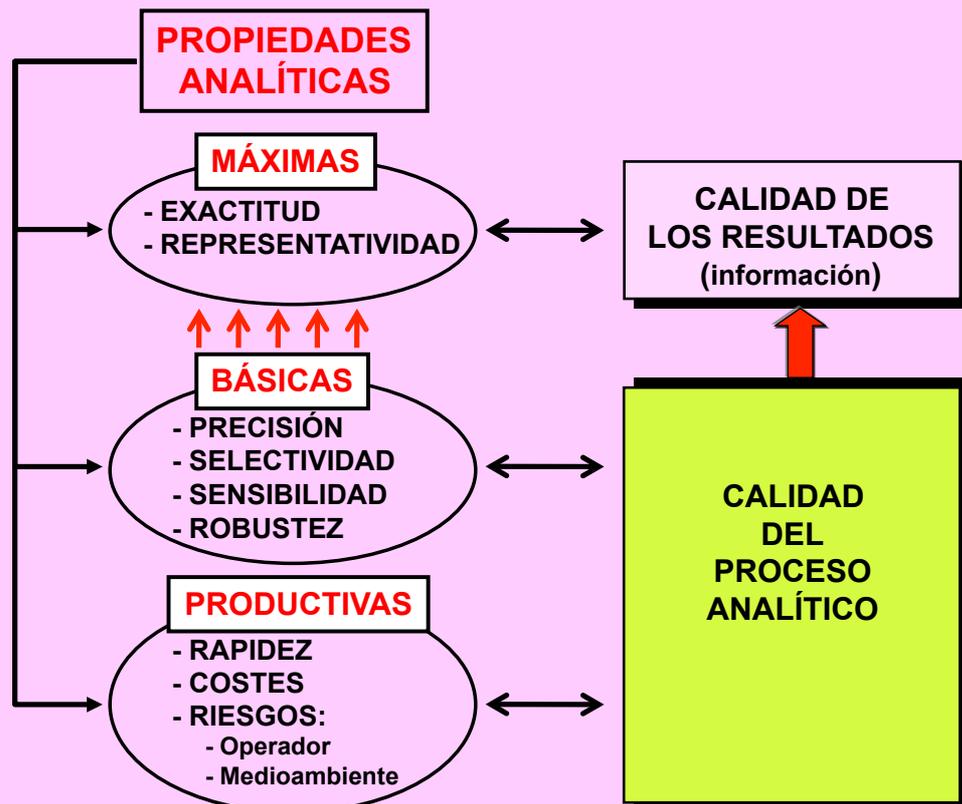
LA QUÍMICA ANALÍTICA HOY Y MAÑANA

PRODUCTOS I+D+I



LA QUÍMICA ANALÍTICA HOY Y MAÑANA

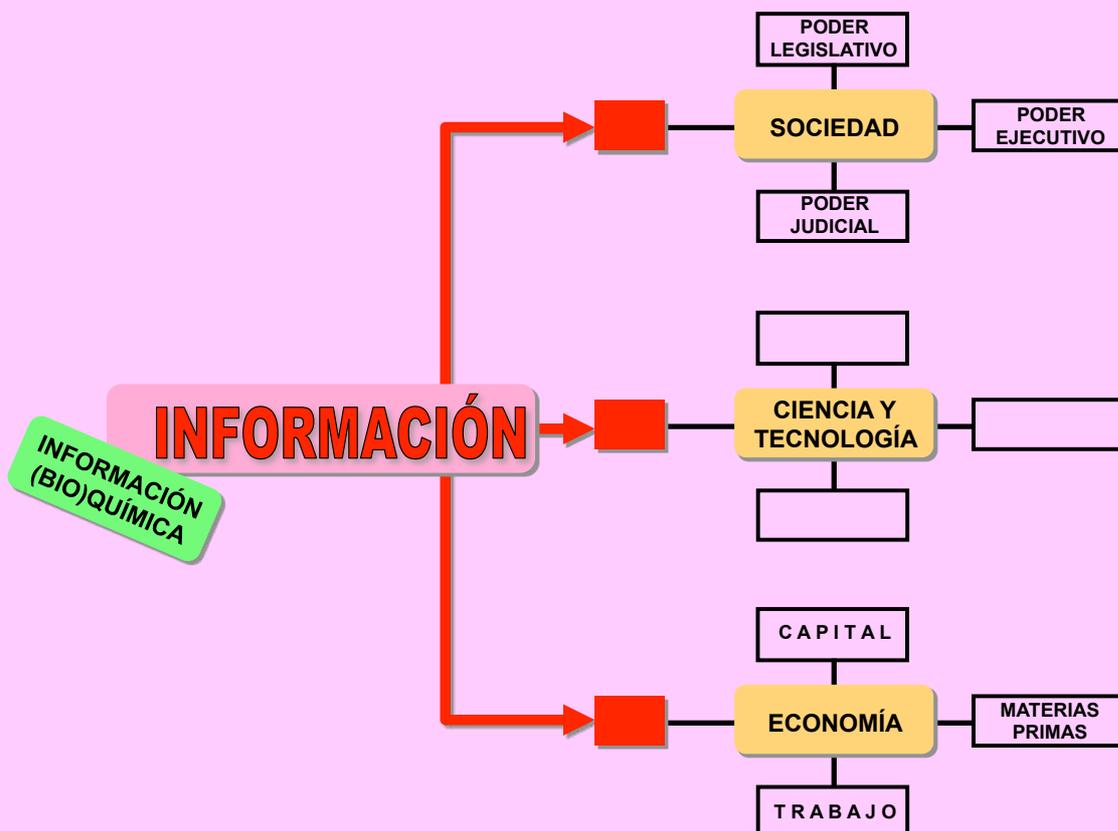
INDICADORES DE CALIDAD



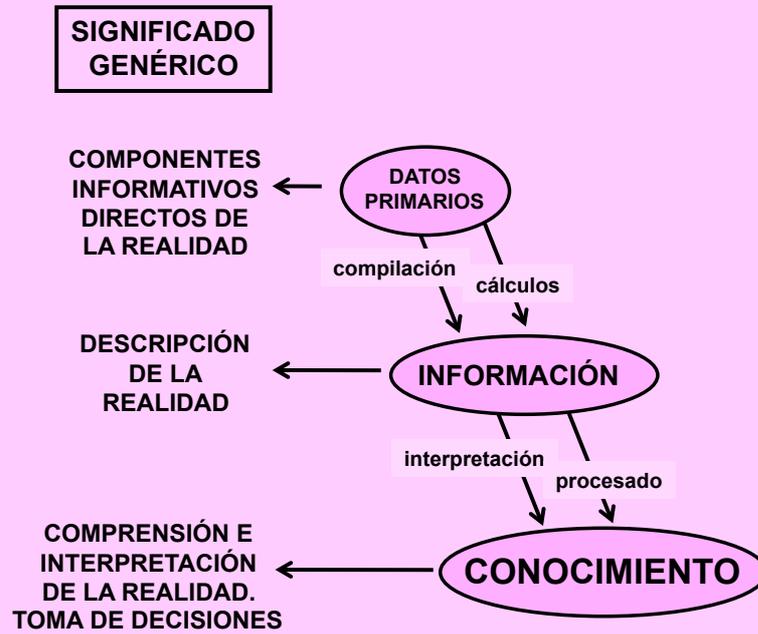
LA SECUENCIA DATOS-INFORMACIÓN-CONOCIMIENTO

LA INFORMACIÓN COMO ENLACE
ENTRE LOS DATOS
Y EL CONOCIMIENTO

EL IMPACTO DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA



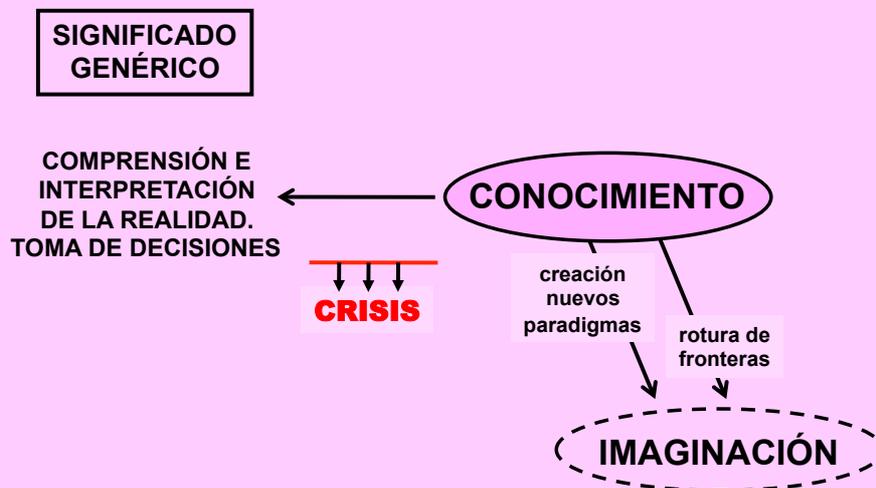
JERARQUÍA DATOS/INFORMACIÓN/CONOCIMIENTO



JERARQUÍA DATOS/INFORMACIÓN/CONOCIMIENTO

EN TIEMPOS DE CRISIS, SÓLO LA IMAGINACIÓN ES MÁS IMPORTANTE QUE EL CONOCIMIENTO

A. EINSTEIN



SEGUNDA PARTE

**LA INFORMACIÓN
(BIO)QUÍMICA**

DEFINICIÓN

TIPOS

EVOLUCIÓN

LA INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA

DEFINICIÓN (1)

¿SOBRE QUÉ?

OBJETOS, SISTEMAS {
NATURALES
ARTIFICIALES

¿PARA QUÉ?

- PARA DESCRIBIR OBJETOS Y SISTEMAS
- PARA COMPRENDER MECANISMOS Y PROCESOS
- PARA APOYAR AL I+D+i (enfoque MULTIDISCIPLINAR)
- ★ PARA TOMAR DECISIONES FUNDAMENTADAS, EFICACES Y EFICIENTES EN ÁMBITOS CIENTÍFICOS, SOCIALES, INDUSTRIALES, ECONOMICOS, etc

LA INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA

DEFINICIÓN (2)

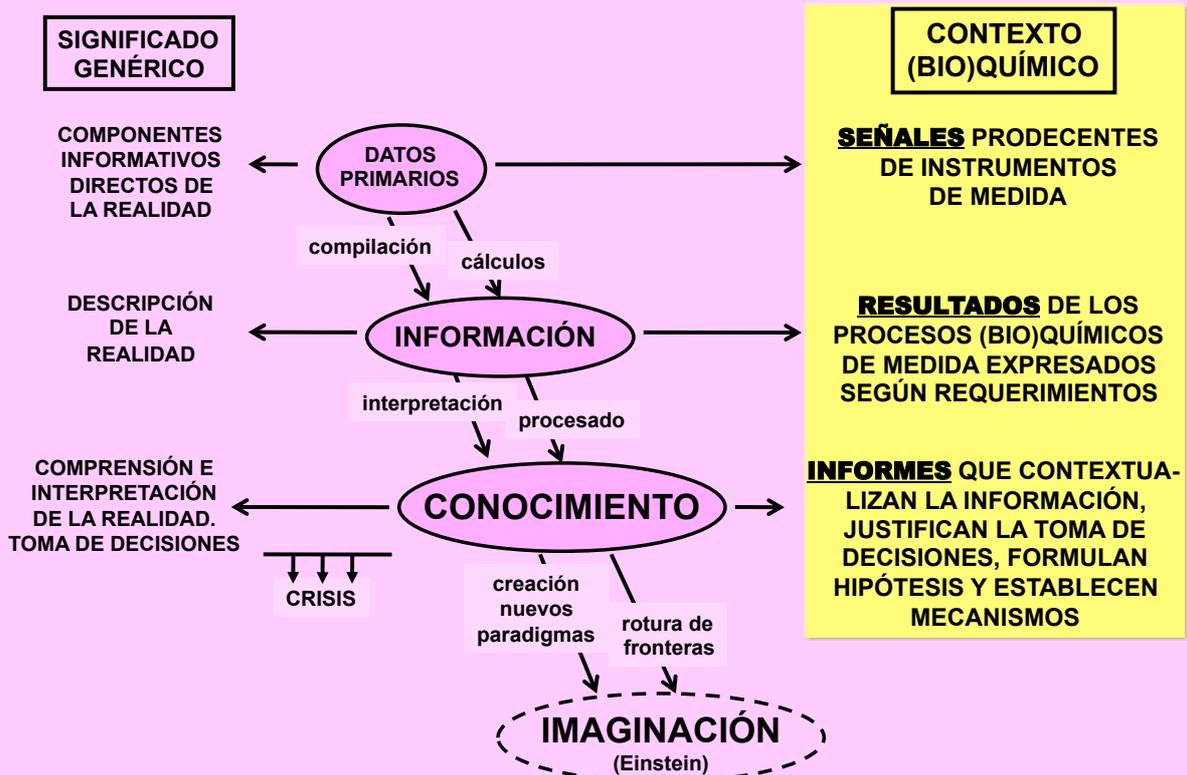
NOTAS

- EQUIVALENCIA ENTRE “INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA” E “INFORMACIÓN ANALÍTICA”.
- DIFERENCIACIÓN DÉBIL ENTRE “ANÁLISIS QUÍMICO” Y “ANÁLISIS BIOQUÍMICO”. LA DENOMINACIÓN QUE DEPENDE DE LA NATURALEZA DE:



LA INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA

DEFINICIÓN (3)



LA INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA

CLASIFICACIONES



LA INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA

TIPO 1



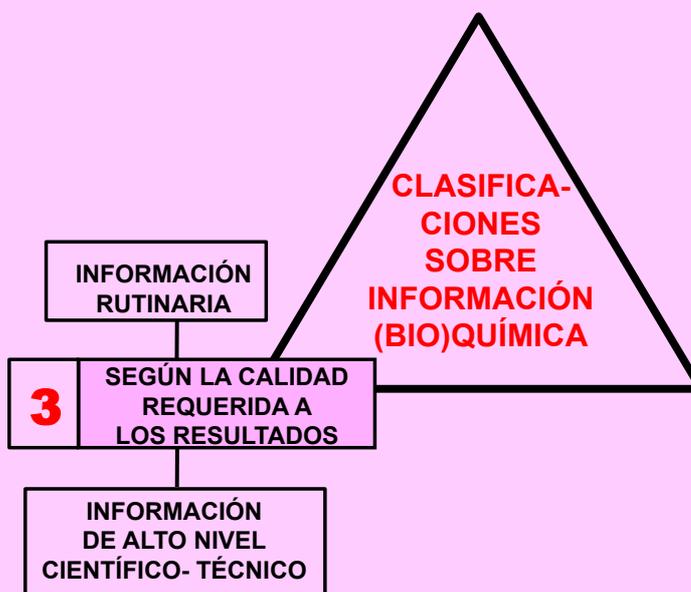
LA INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA

TIPO 2



LA INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA

TIPO 3 (I)



LA INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA

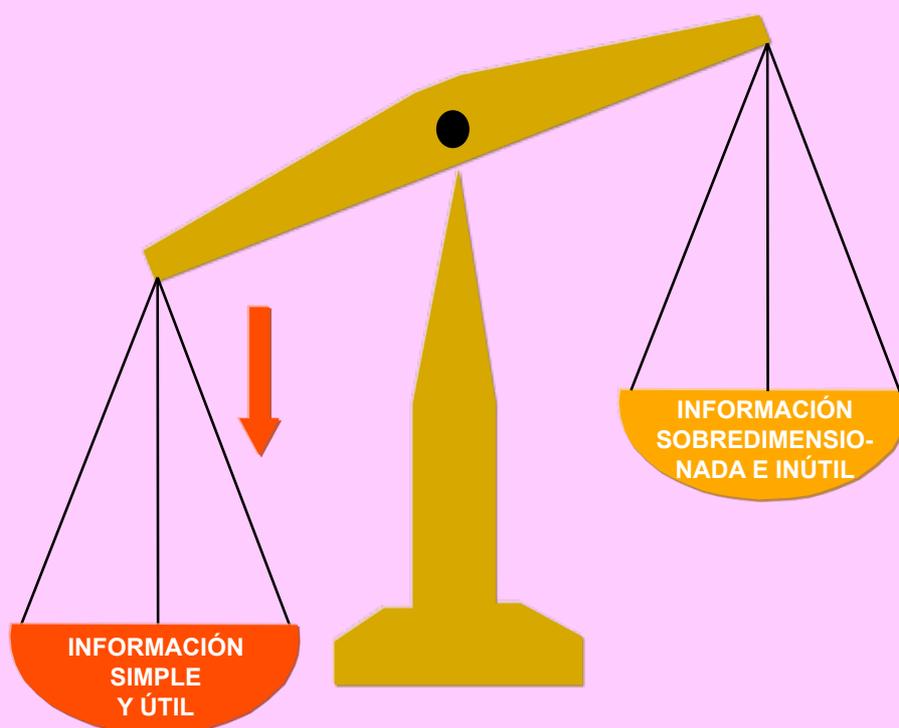
TIPO 3 (II)



EVOLUCIÓN DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE RUTINA



EVOLUCIÓN DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE RUTINA)



EVOLUCIÓN DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE RUTINA

EJEMPLO DE LA NECESIDAD DE SIMPLIFICAR LA INFORMACIÓN ANALÍTICA

■ **PROBLEMA:** Contaminación de aguas por hidrocarburos

■ **LÍMITE PERMITIDO (UE):** 0.1 µg/L de hidrocarburos totales

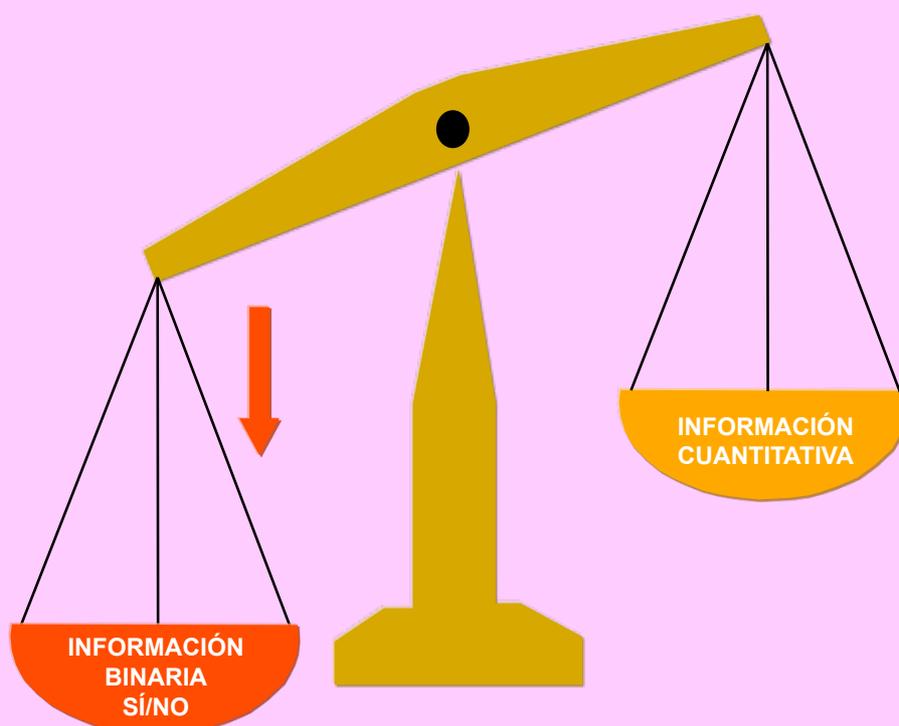
■ **PROCEDIMIENTO TRADICIONAL:**

- Proceso analítico:
 - Preconcentración de los hidrocarburos mediante SPE
 - Evaporación a sequedad del extracto
 - Determinación de hidrocarburos por CG-EM
- Resultado: Listado de hidrocarburos aromáticos y alifáticos a niveles de ppt y ppb con sus respectivas incertidumbres. Dudas sobre su empleo
- Tiempo: ~ 48 horas
- Esfuerzo: medio-alto
- Costes: medio-alto

■ **PROCEDIMIENTO SIMPLIFICADO:**

- Proceso analítico:
 - Extracción L-L con un disolvente no hidrogenado (C₁Cl₄)
 - Determinación de hidrocarburos totales por FTIR
- Resultado: Concentración total de hidrocarburos comparable con el límite legal en menos de 10 minutos

EVOLUCIÓN DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE RUTINA

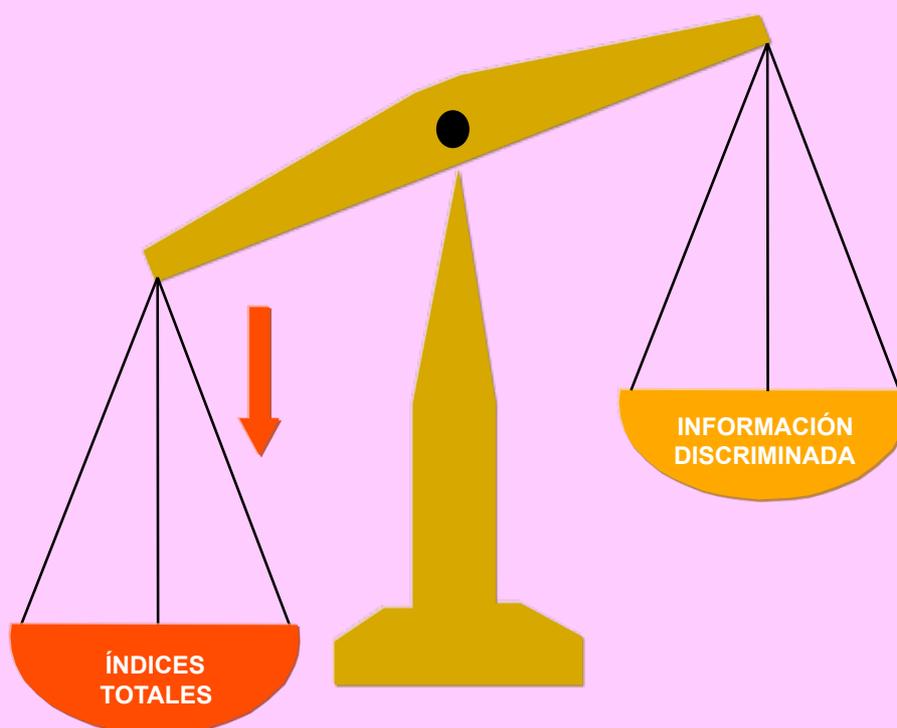


EVOLUCIÓN DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE RUTINA

EJEMPLO DE LA IMPORTANCIA CRECIENTE DE LA INFORMACIÓN BINARIA SÍ/NO

- **PROBLEMA:** Presencia de plaguicidas en productos hortofrutícolas
- **LÍMITE PERMITIDO (EXPORTACIÓN):** 0.05 ng/Kg
- **PROCEDIMIENTO TRADICIONAL:**
 - Extracción sólido-líquido
 - Preconcentración, clean-up
 - Evaporación a sequedad
 - Determinación por CL-MS
 - Resultado: Listado de plaguicidas de muchos tipos
- **PROCEDIMIENTO EN FASE DE IMPLANTACIÓN:**
 - Extracción sólido-líquido
 - Determinación del extracto por introducción directa al EM
 - Resultado: Hay o no hay plaguicidas (respuesta binaria)
Problema: fiabilidad (que no se produzcan falsos negativos)

EVOLUCIÓN DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE RUTINA



EVOLUCIÓN DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE RUTINA

EJEMPLO DE LA IMPORTANCIA CRECIENTE DE LOS ÍNDICES TOTALES RESPECTO A LA INFORMACIÓN CUANTITATIVA DISCRIMINADA

■ **PROBLEMA:** Antioxidantes en alimentos (ej. vinos, aceite de oliva)

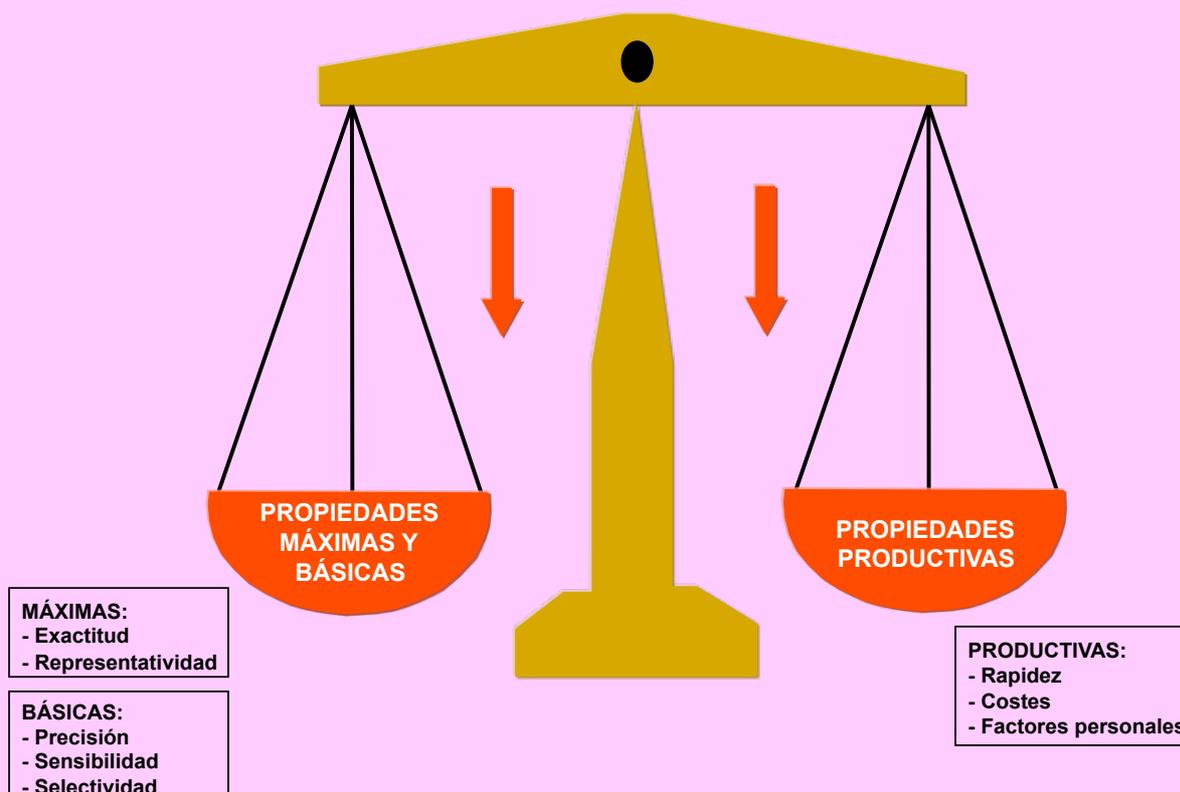
■ **PROCEDIMIENTO TRADICIONAL:**

- Extracción por etapas de los diferentes tipos de antioxidantes (ej. polifenoles, tocofenoles, resveratrol, etc).
- Preconcentración
- Determinación por CL-MS de diferentes extractos
- Resultado: Listado cuantitativo de los variados antioxidantes

■ **PROCEDIMIENTO ACTUAL:**

Introducción directa del alimento (sólido o líquido) en un instrumento comercial que ofrece un **ÍNDICE DE ANTIOXIDANTES TOTALES**

EVOLUCIÓN DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE RUTINA



EVOLUCIÓN DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE RUTINA

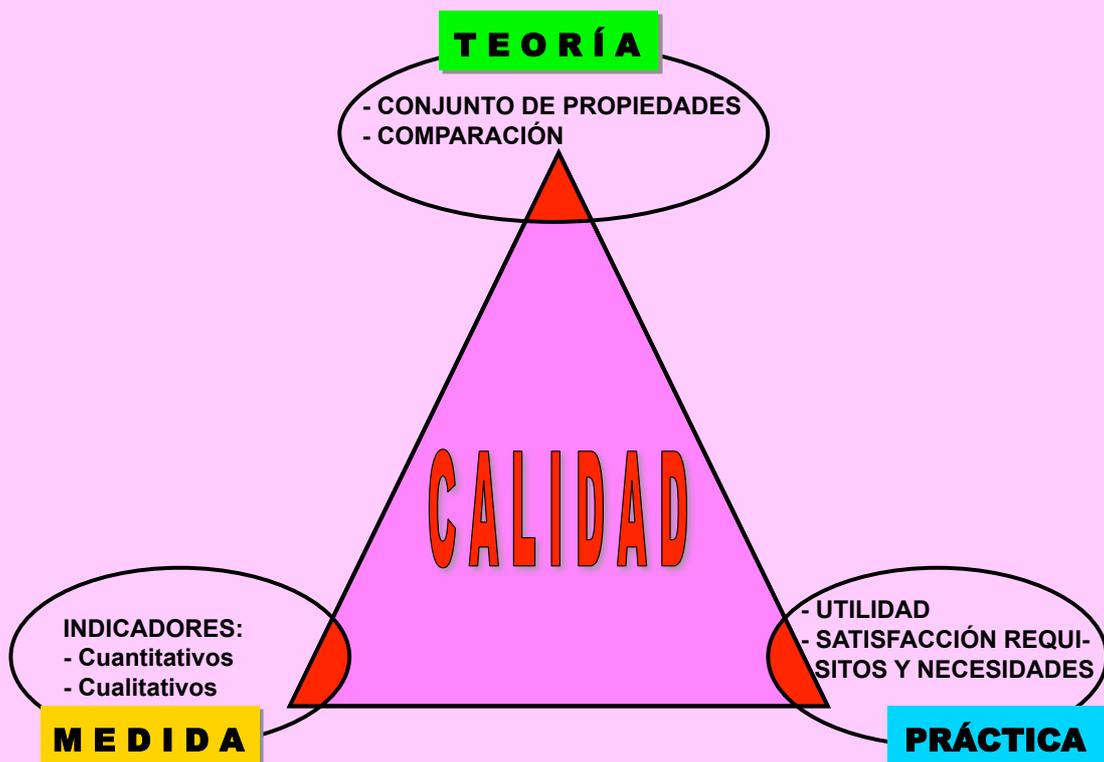
EJEMPLO DE LA IMPORTANCIA RELATIVA DE LAS PROPIEDADES ANALÍTICAS MÁXIMAS Y PRODUCTIVAS

- **INFORMACIÓN REQUERIDA:** Monitorización “in situ” del nivel de glucosa en sangre de enfermos diabéticos en ayunas.
- **SOLUCIÓN:** Empleo de una gran variedad de **GLUCOSÍMETROS** basados en las medidas ópticas o electroanalíticas en tiras reactivas que integran la diálisis y una reacción enzimática en una gota de sangre
- **INCONVENIENTE:** Error (10-15%) asociado a los resultados de contenido de glucosa en sangre
- **VENTAJA:** Comodidad de los enfermos

LAS PROPIEDADES PRODUCTIVAS (rapidez y factores personales, además de La simplicidad) PREVALECEM SOBRE LA PROPIEDAD MÁXIMA: EXACTITUD

LA CALIDAD DE LA INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA

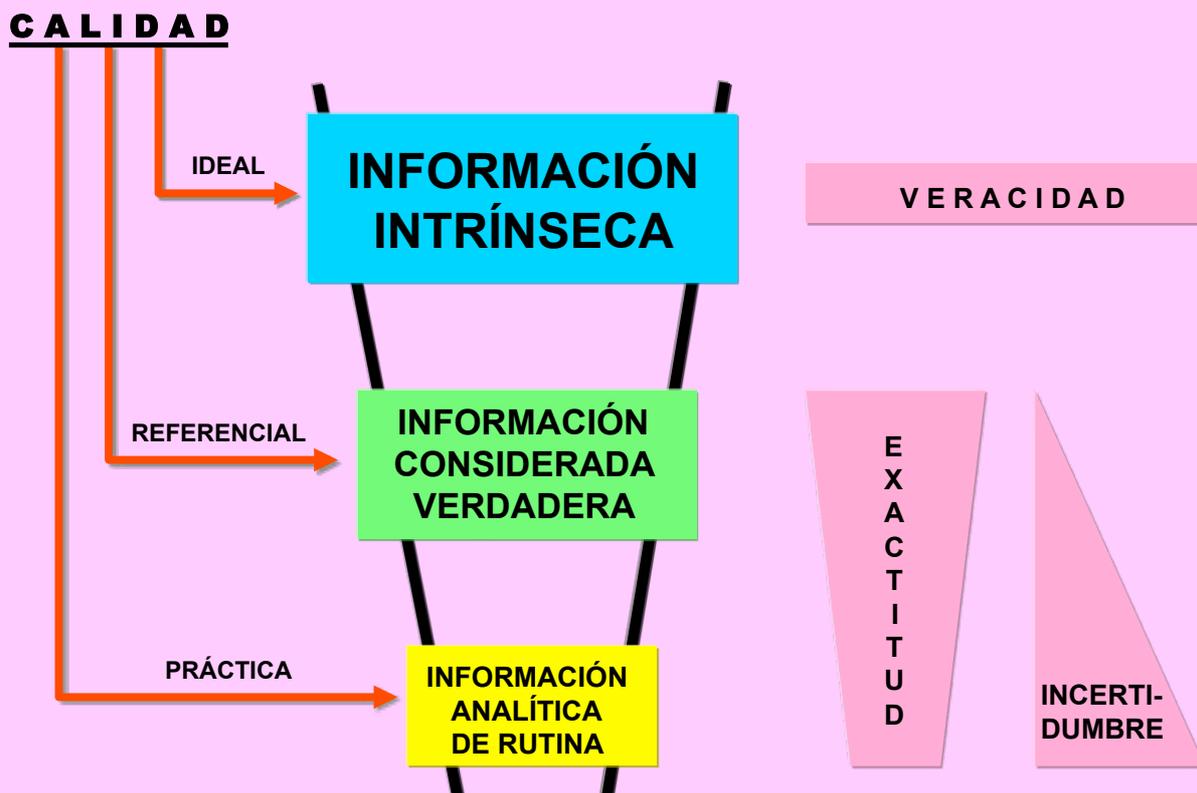
CONCEPTO INTEGRAL DE CALIDAD



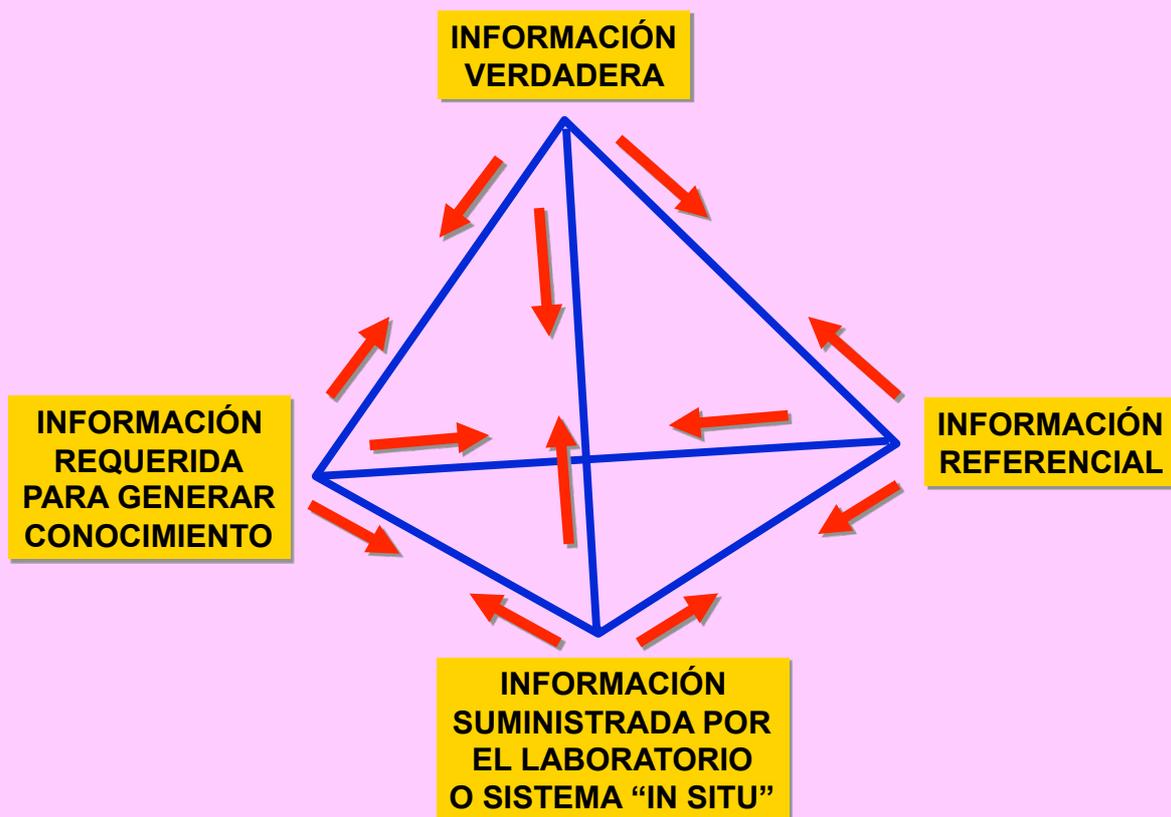
APLICACIÓN DEL CONCEPTO INTEGRAL DE CALIDAD A LA INFORMACIÓN(BIO)QUÍMICA



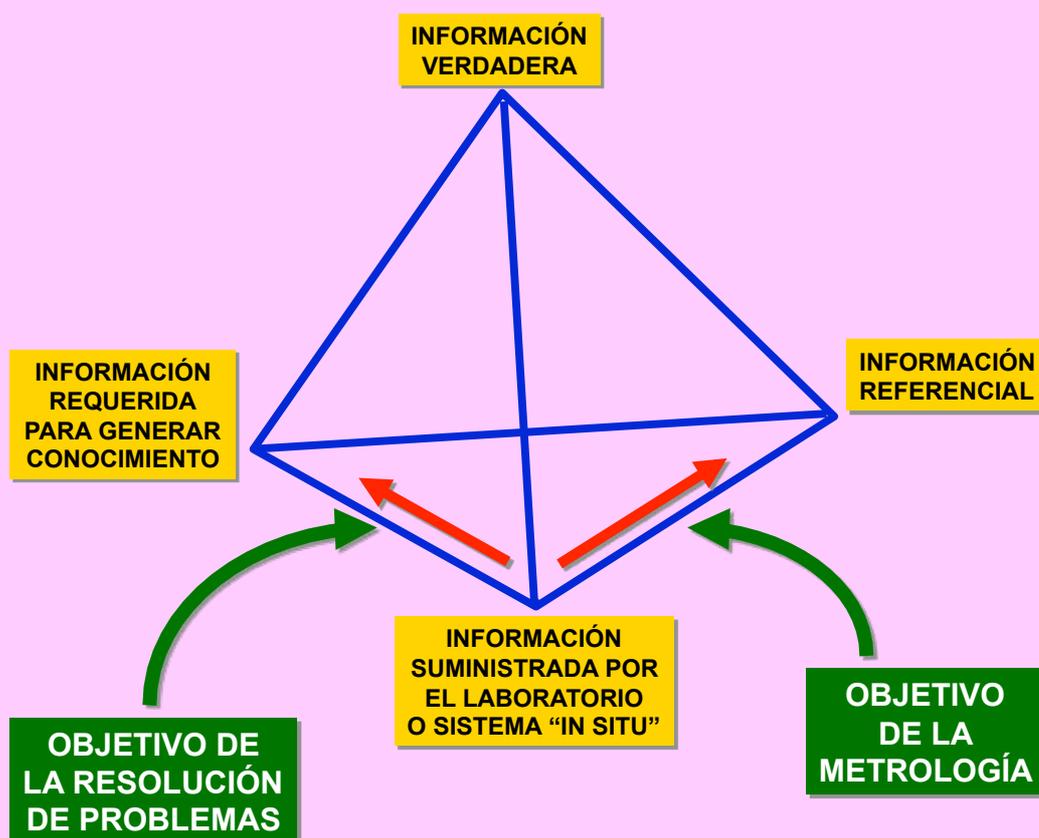
TIPOS DE INFORMACIÓN ANALÍTICA



LOS CUATRO TIPOS DE INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA, SEGÚN SU CALIDAD



CONTRADICCIONES EN LA CALIDAD DE LA INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA



LA QUÍMICA ANALÍTICA EN LA INTERFASE (1)

OGÍA

ICA

RES

PRO

LA QUÍMICA ANALÍTICA EN LA INTERFASE (1)

**TROLOGÍA
EN
MICA**

**RESOLU
DE
PROBL**

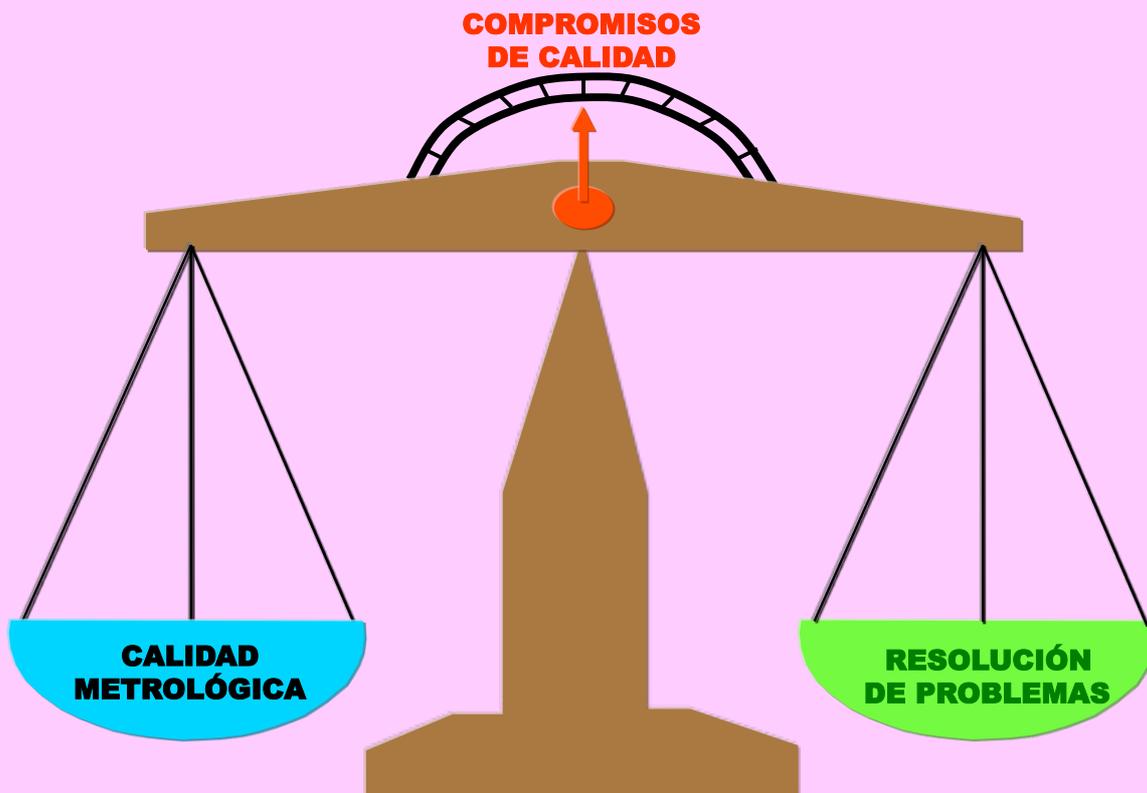
LA QUÍMICA ANALÍTICA EN LA INTERFASE (1)



LA QUÍMICA ANALÍTICA EN LA INTERFASE (2)



LA QUÍMICA ANALÍTICA EN LA INTERFASE (3)



COMPROMISOS DE CALIDAD

EJEMPLO

UNA INFORMACIÓN QUÍMICA A TIEMPO CON UN 10% DE INCERTIDUMBRE ES MEJOR QUE OTRA INFORMACIÓN CON UN 0.1% DE INCERTIDUMBRE, PERO SUMINISTRADA TARDE PARA TOMAR UNA DECISIÓN CORRECTA



RETOS

RETOS EN LA GENERACIÓN Y USO DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE CALIDAD

DESAFÍOS

1

BALANCE ENTRE METROLOGÍA Y RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS EN CADA DEMANDA INFORMATIVA

2

INFORMACIÓN DE OBJETOS/SISTEMAS INASEQUIBLES DIRECTAMENTE POR EL HOMBRE

3

ROTURA DE LAS FRONTERAS TRADICIONALES DEL LABORATORIO (BIO)QUÍMICO DE RUTINA

4

ESTRATEGIAS DE VANGUARDIA-RETAGUARDIA

5

OTROS

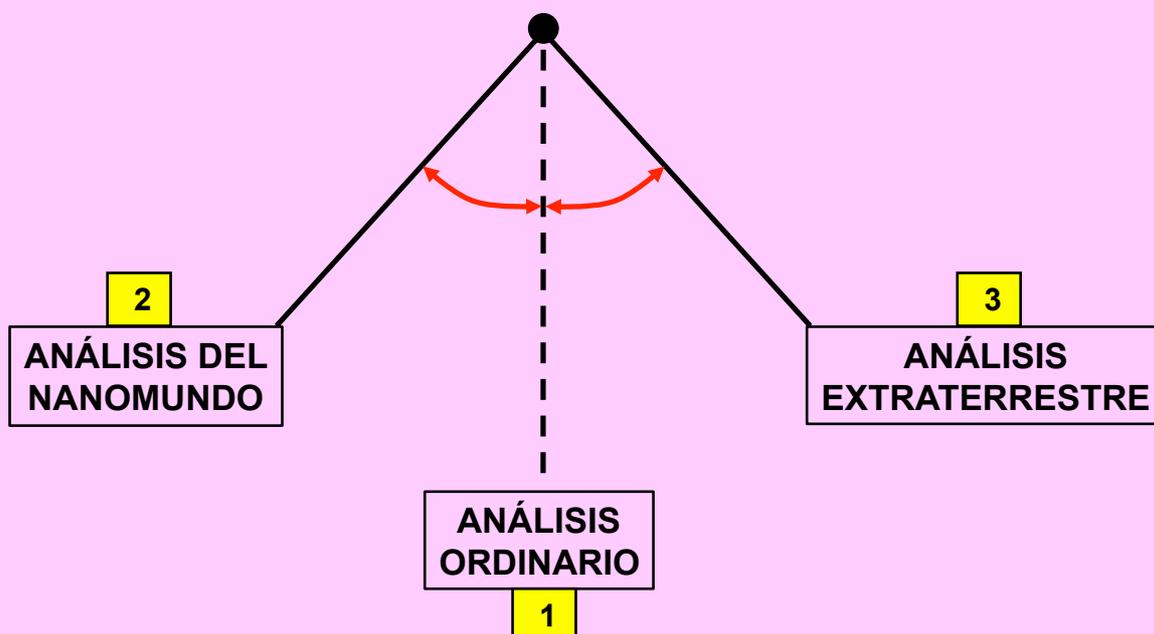
RETOS EN LA GENERACIÓN Y USO DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE CALIDAD

RETO 1 BALANCE ENTRE METROLOGÍA Y RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS EN CADA DEMANDA INFORMATIVA (BIO)QUÍMICA

- DIFERENCIAR ENTRE $\left\{ \begin{array}{l} \text{INFORMACIÓN RUTINARIA} \\ \text{INFORMACIÓN DE ALTO NIVEL CIENTÍFICO-TÉCNICO} \end{array} \right.$
- TENER EN CUENTA TODOS LOS INDICADORES DE CALIDAD (PROPIEDADES ANALÍTICAS MÁXIMAS, BÁSICAS Y PRODUCTIVAS) Y SUS RELACIONES ENTRE SÍ (parangón con el denominado “cuadro de mandos” de una empresa).
- MATERIALIZACIÓN DE LOS DENOMINADOS COMPROMISOS DE CALIDAD.

RETOS EN LA GENERACIÓN Y USO DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE CALIDAD

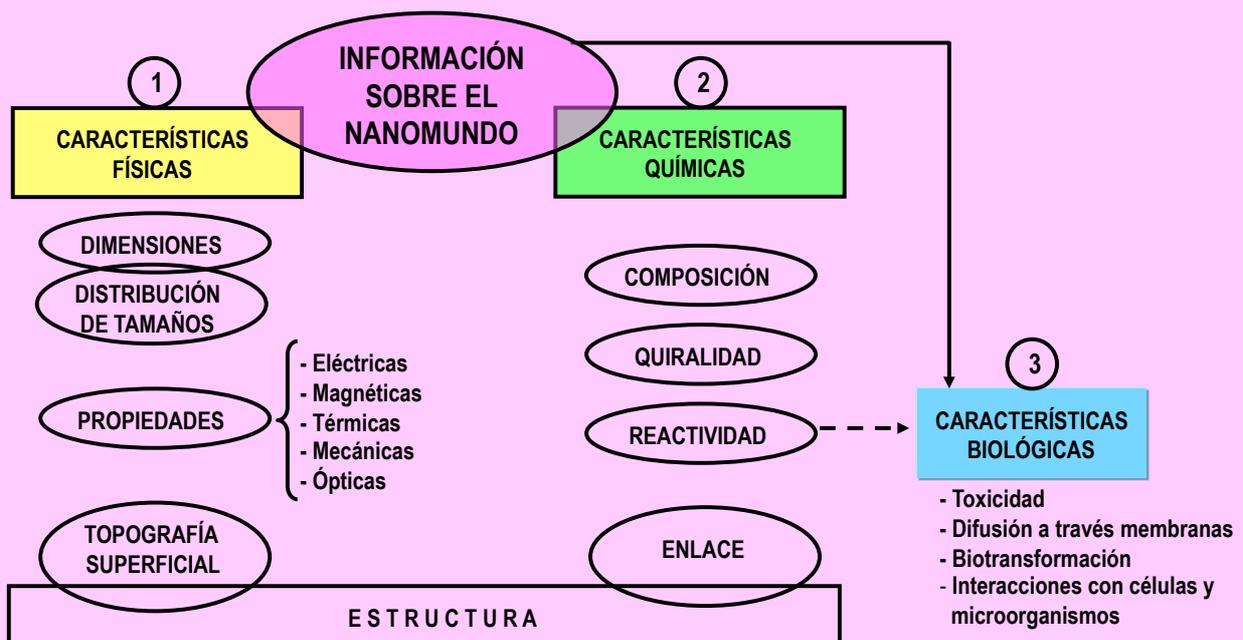
RETO 2 INFORMACIÓN DE OBJETOS/SISTEMAS LEJANOS AL NIVEL MACROSCÓPICO ORDINARIO



ANÁLISIS DEL NANOMUNDO (1)

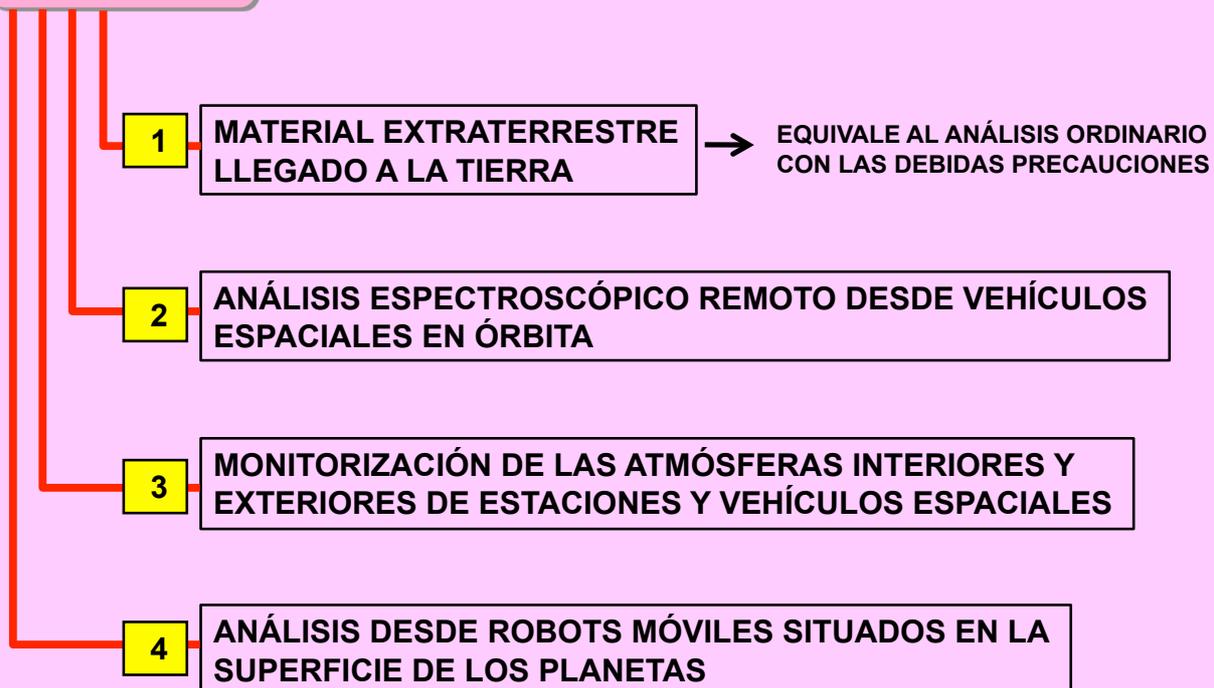
- **RETO DE LA QUÍMICA ANALÍTICA DEL HOY Y MAÑANA DADO EL IMPACTO CRECIENTE DE LA NANOTECNOLOGÍA.**
- **LA NANOMETROLOGÍA ES UN GRAN DESAFÍO EN ESTE CONTEXTO: FIABILIDAD DE LAS MEDIDAS.**
- **NECESIDAD DE UN ENFOQUE INTERDISCIPLINAR.**
- **TRIPLE ENFOQUE DE LA INFORMACIÓN.** 
- **TENDENCIA ACTUAL: INTEGRACIÓN DE TECNOLOGÍAS INFORMATIVAS FÍSICAS (ej. AFM) Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS (ej. electroquímica, espectroscopía de FTIR y Raman), GENERANDO INFORMACIÓN (CASI) SIMULTÁNEA.**

ANÁLISIS DEL NANOMUNDO (2)



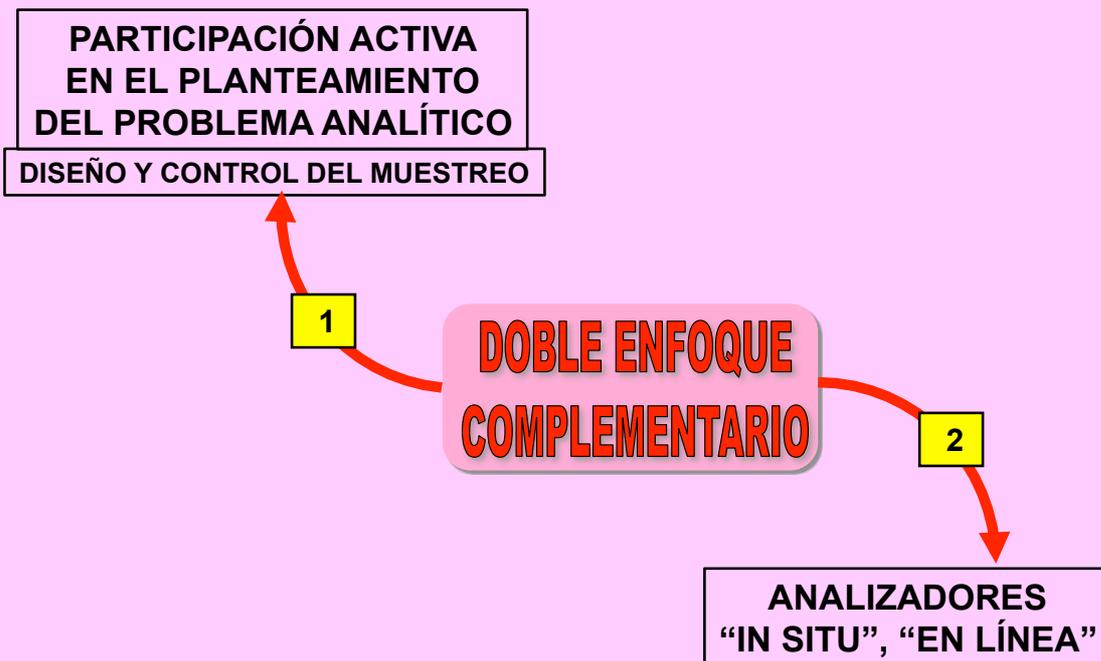
INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA DEL ESPACIO EXTERIOR

OPCIONES



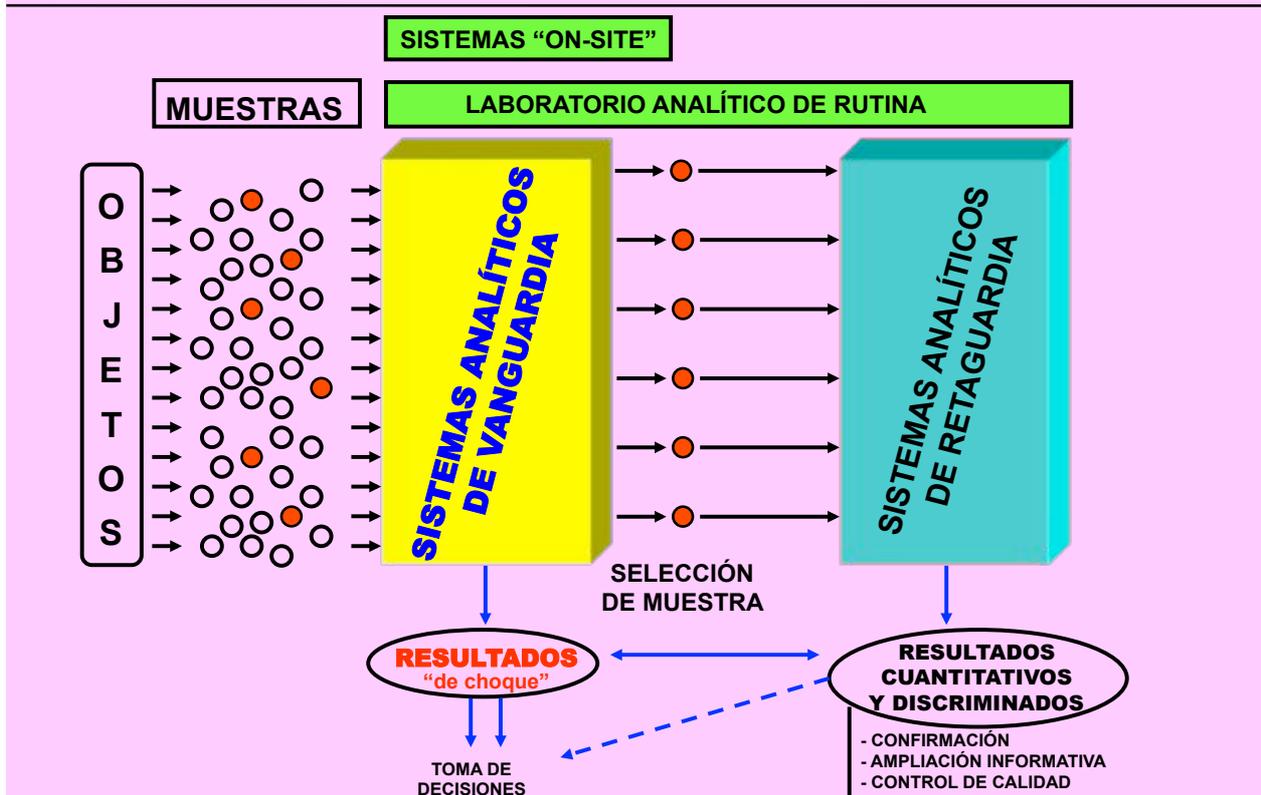
RETOS EN LA GENERACIÓN Y USO DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE CALIDAD

RETO 3 ROTURA DE LAS FRONTERAS TRADICIONALES DEL LABORATORIO (BIO)QUÍMICO

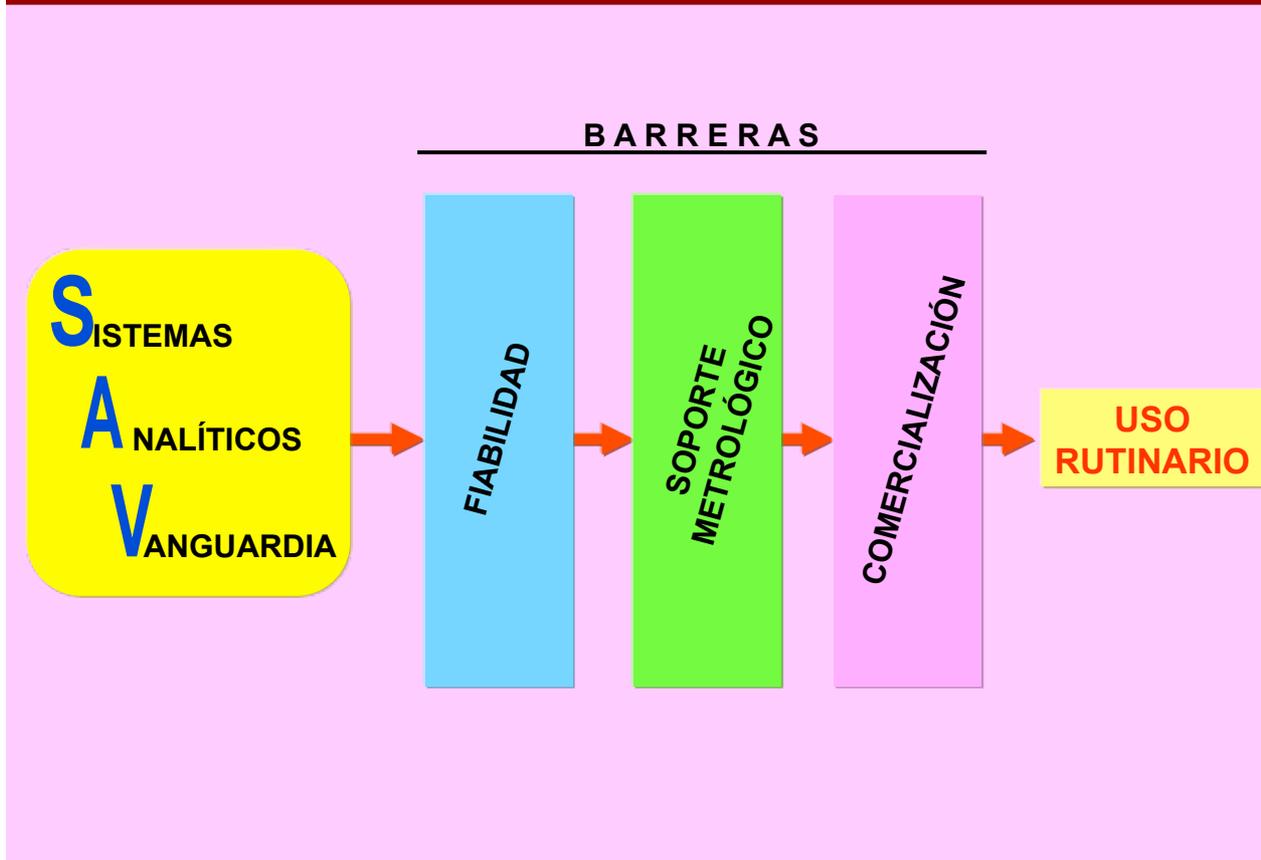


RETOS EN LA GENERACIÓN Y USO DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE CALIDAD

RETO 4 SISTEMAS ANALÍTICOS DE VANGUARDIA-RETAGUARDIA



IMPLANTACIÓN DE SISTEMAS DE VANGUARDIA EN ANÁLISIS DE RUTINA



INFORMACIÓN (BIO)QUÍMICA DE CALIDAD

E. Aguilera-Herrador, M. Valcárcel

Resumen: El producto del Análisis, tercer componente básico de la Química, es la información (bio)química, la cual puede ser de muy variada naturaleza. En este artículo se pretende ofrecer una visión actual y futura de la Química Analítica ampliando sus referencias tradicionales y enfatizando en los denominados compromisos de calidad entre la metrología y la resolución de problemas teniendo siempre presente la calidad de la información generada.

Palabras clave: Química Analítica, información (bio)química, compromisos de calidad, metrología, resolución de problemas.

Abstract: The output of the Analysis, the third basic component of Chemistry, is the (bio)chemical information, which can be of different types. The main purpose of this article is to show a present and future vision of Analytical Chemistry by expanding the traditional references and considering the named "quality compromises" between metrology and problem solving, taking always into account the quality of the information generated.

Keywords: Analytical Chemistry, (bio)chemical information, quality compromises, metrology, problem solving.

II Curso de divulgación

Los avances de la Química y su impacto en la sociedad"

Instituto de Química Orgánica General. CSIC. Madrid, sep. 2010 - Feb. 2011

EL IMPACTO DE LA INFORMACIÓN QUÍMICA DE CALIDAD
MUCHAS GRACIAS
POR SU ATENCIÓN

21 de octubre de 2010



Miguel Valcárcel
Eva Aguilera
Universidad de Córdoba