

3° ESCUELA DE QUIMIOMETRÍA

23 AL 26 DE ENERO 2023

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, la disposición de grandes volúmenes de datos requiere de profesionales competentes que puedan analizar e interpretar la información disponible en ellos. En particular, la Quimiometría permite el análisis de datos (bio)químicos generados durante la investigación o desarrollo de procesos nuevos o existentes. En la presente instancia, revisaremos los tópicos más relevantes de esta disciplina en una modalidad teórica práctica.

PÚBLICO OBJETIVO

La Escuela de Quimiometría está dirigida a estudiantes de pregrado y postgrado del área de la Química, Bioquímica, Ingeniería y de carreras afines. Además, pueden participar profesionales del sector productivo que deseen conocer o ampliar su conocimiento en el análisis de datos en contextos de investigación y desarrollo.

MODALIDAD

Las actividades serán realizadas en formato híbrido entre el 23 y el 26 de enero 2023, de 9.00 a 17.30 horas. Las clases presenciales se realizarán en la Facultad de Ciencias de la Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, ubicada en el Campus Curauma, Av. Universidad 330, Valparaíso.

Para quienes deseen participar de forma sincrónica de forma remota se utilizará la plataforma Zoom.

RELATORES



MANUEL A. BRAVO M.

Docteur en Chimie et Microbiologie de l'eau (Université de Pau, Francia, 2004) y Doctor en ciencias con mención en química (PUCV, Chile, 2005). Académico y Profesor Titular del Instituto de Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, desde 2008. Presidente de la División de química Analítica y Ambiental, de la Sociedad Chilena de Química (desde 2018-2022). Decano de la Facultad de Ciencias de la PUCV (2019 a la fecha). Sus líneas de investigación se basan en:

- Desarrollo de métodos analíticos para la determinación de contaminantes orgánicos e inorgánicos con interés toxicológico y ambiental- Uso de herramientas quimiométricas para la determinación de contaminantes ambientales.

Email: manuel.bravo@pucv.cl



EDWAR FUENTES P.

Doctor en Ciencias con Mención en Química (PUCV, Chile, 2002). Docteur en Chimie et Microbiologie de l'eau (Université de Pau, Francia, 2002). Académico, Profesor Asociado de la Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas de la Universidad de Chile desde 2003. Presidente de la División de Química Analítica y Ambiental de la Sociedad Chilena de Química entre 2014 y 2018. Director del Departamento de Química Inorgánica y Analítica (FCQyF) entre 2018 y 2021. Su línea de investigación:

- Química Analítica asociada al estudio de compuestos orgánicos y elementos traza en el medio ambiente y alimentos.
- Quimiometría como herramienta eficiente para el diseño de experimentos, calibración multivariada y manejo e interpretación de la información analítica.

Email: edfuentes@ciq.uchile.cl



CLAUDIO BRAVO L.

Doctor en Química Forense Ambiental (University of Wales, UK, 2007). Académico y Profesor Asociado del Instituto de Ciencias Químicas, Universidad Austral de Chile, desde el 2008. Encargado de la oficina de Investigación de la Facultad periodo 2020-2021 y encargado de Nodo I+D+e+ct de la Facultad de Ciencias desde el 2020 a la fecha.

Sus líneas de investigación se basan en:

- Química Forense Ambiental y uso de herramientas quimiométricas para determinar fuente de contaminantes
- Soluciones Basadas en la Naturaleza para la limpieza, tratamiento y remediación de contaminantes.

Email: cbravo@uach.cl



ROSARIO CASTILLO F.

Doctora en Ciencias con mención en Química. Universidad de Concepción. 2008. Profesora Titular de la Facultad de Farmacia, & Directora del Centro de Biotecnología de la Universidad de Concepción. Responsable de las asignaturas de Quimiometría, Espectroscopía vibracional y análisis de imágenes hiperespectrales y métodos de calibración multivariada en el Programa de Doctorado en ciencias y tecnología analítica de la Universidad de Concepción. Sus líneas de investigación se basan en:

- Desarrollo analítico aplicado a la biotecnología vegetal
- Bioespectroscopía molecular aplicada al análisis de recursos naturales
- Química de la madera y de compuestos lignocelulósicos.
- Quimiometría y análisis de datos multivariados



SANDRA ORELLANA D.

Doctora en Química de la Universidad de Chile, 2009. Postdoctorado Fondecyt, 2011. Académica a cargo del Laboratorio Química Analítica y Elementos Trazas, del Instituto de Ciencias Químicas de la Facultad de Ciencias de la Universidad Austral de Chile desde el año 2014. Presidenta del Comité Organizador del XIII Encuentro de Química Analítica y Ambiental de la Sociedad Chilena de Química realizado en Valdivia, 2016. Secretaria de la Sociedad Chilena de Química (2022-2024). Sus líneas de investigación se basan en:

- Desarrollo de metodologías analíticas para determinación de fármacos de interés veterinario y humano en matrices biológicas, alimentos, y medio ambientales, utilizando espectroscopía de absorción molecular, atómica, derivada, técnicas cromatográficas HPLC-MS.
- Desarrollo de materiales poliméricos de interés biológico, con aplicaciones analíticas.

CONTENIDOS

MÓDULO 1: DISEÑO DE EXPERIMENTOS – 23 DE ENERO

PROFESOR DR. EDUAR FUENTES

MODALIDAD HÍBRIDA

Módulo Teórico 3 horas	<ul style="list-style-type: none">• Diseños factoriales (etapa exploratoria)• Cálculos matriciales y modelos de respuestas• Calidad de los modelos y test de significancia• Diseño compuesto central ($2n + 2n + c$)• Diseño de celda uniforme o Doehlert ($N^2 + N + 1$)
Módulo Práctico 3 horas	<ul style="list-style-type: none">• Aplicación del diseño de compuesto central a la optimización de la determinación espectrofotométrica de hierro con O-fenantrolina.

MÓDULO 2: QUIMIOMETRÍA FORENSE – 24 DE ENERO

PROFESOR DR. MANUEL BRAVO

MODALIDAD HÍBRIDA

Módulo Teórico 2 horas	<ul style="list-style-type: none">• Ejemplos de casos ambientales para resolución de casos ambientales usando quimiometría• Herramientas quimiométricas más comunes en la resolución de casos ambientales
Módulo Práctico 3 horas	<ul style="list-style-type: none">• Ejemplo práctico de aplicación. Aplicación de caso de estudio de PCA utilizando R.

MÓDULO 3: ESPECTROSCOPÍA DERIVADA – 24 DE ENERO

PROFESORES DRA. SANDRA ORELLANA Y DR. CLAUDIO BRAVO

MODALIDAD REMOTA

Módulo Teórico 2 horas	<ul style="list-style-type: none">• Teoría de técnicas espectrofotométricas complejas• Ejemplos de aplicación en el contexto del desarrollo de metodologías analíticas
Módulo Práctico 3 horas	<ul style="list-style-type: none">• Análisis cuantitativo de fármacos por métodos espectrofotométricos.• Determinación directa y en mezclas por espectrofotometría derivada UV- vis.

MÓDULO 4: CALIBRACIÓN MULTIVARIADA – 25 DE ENERO

PROFESORA DRA. ROSARIO CASTILLO

MODALIDAD REMOTA

Módulo Teórico 4 horas	<ul style="list-style-type: none">• Teoría y algoritmos (PCR, PLS, MCR-ALS)• Software y ejemplos de aplicación
Módulo Práctico 3 horas	<ul style="list-style-type: none">• Ejemplo práctico de aplicación. Fluorescencia de PAHs.

MÓDULO 5: ANÁLISIS DE IMÁGENES HIPERSPECTRALES – 26 DE ENERO

Módulo Teórico 3 horas	<ul style="list-style-type: none">• Teoría y algoritmos (PCA, MCR-ALS, PLS-DA)• Software y ejemplos de aplicación
Módulo Práctico 3 horas	<ul style="list-style-type: none">• Ejemplo práctico de aplicación

INFORMACIÓN GENERAL

El programa de actividades será certificado por el Sistema de Gestión de la Calidad de las Actividades de Extensión Académica de la Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, según norma NCH 2728.

Los participantes deberán completar el siguiente formulario de inscripción en el siguiente enlace <https://forms.gle/FGMjEMfBD24VEj1S8>.

Cupos limitados. Los enlaces de las sesiones no presenciales se enviarán por correo electrónico previo al inicio del Programa.

VALORES

Para estudiantes de pregrado o postgrado, el valor del programa será de \$10.000 por certificación. La condición de estudiante deberá ser acreditada antes del comienzo de la presente actividad académica, a través de Certificado de Alumno Regular, Avance Curricular o similar, durante el segundo semestre del 2022.

Cada participante no asociado a la academia deberá pagar una inscripción de \$100.000.

MODALIDADES DE PAGO

La matrícula se considera una vez efectuado el pago, luego de ser aceptado en el Programa, el cual puede ser al contado en efectivo, transferencia electrónica a la cuenta de la Pontificia Universidad Católica de Valparaíso.

El pago a través de transferencia electrónica se realiza con la siguiente información:

- Banco Scotiabank
- Cuenta a nombre de Pontificia Universidad Católica de Valparaíso
- Cuenta corriente N° 610995606
- Rut: 81.669.200-8
- Asunto: Escuela de Quimiometria

Una vez realizado el pago enviar comprobante a Daniela Vilches, Secretaria de la Dirección de Asistencia Técnica y Capacitación del Instituto de Química PUCV, enviando un correo a datyc.quimica@pucv.cl

Para pagar al contado en efectivo o tarjeta de crédito, se debe coordinar previamente escribiendo a datyc.quimica@pucv.cl

Para empresas que requieran factura, se genera cotización para posterior emisión de orden de compra. Escribir a datyc.quimica@pucv.cl

Inscripciones hasta el 16 de enero 2023.