

El uso de la IA generativa como una alternativa válida a los tradicionales guiones de prácticas - Una experiencia aplicada a la determinación de la composición de una aleación metálica mediante AAS

Arroyo Cerezo, A.^{a,b}; Pérez Calle, J.L.^a; Castilla Fernández, D.^a; Suárez González, B.^a; Roca Nasser, E.A.^a; Cabeza Rodríguez, C.^a; Jiménez Carvelo, A.M.^a; Cuadros Rodríguez, L.^a

^a Departamento de Química Analítica, Universidad de Granada; ^b Departamento de Química Analítica, Universidad de Extremadura; ✉(arroyoc@ugr.es)

Palabras clave: Prácticas de laboratorio, gestión de la información, inteligencia artificial

1. Introducción

La definición más reciente, reconocida por la IUPAC en 2023, declara que la Química Analítica (QA) es aquella disciplina científica que desarrolla y aplica estrategias, herramientas y procedimientos para obtener información sobre la composición y la naturaleza de la materia en el espacio y en el tiempo. El foco principal ahora se orienta hacia la información.

Esto obliga a cambiar un poco la perspectiva y el enfoque de la metodología docente. La gestión de la información debería ser ahora el objetivo fundamental, diferenciando entre **"información previamente conocida"**, **"información no conocida, pero accesible experimentalmente"** e **"información que se pretende conocer"** (información analítica diana).

Desde nuestro punto de vista, hay cuatro aspectos clave en los que habría que incidir:

- Uso generalizado de la IA generativa como herramienta líder para el acceso a la información.
- Implantación de procedimientos normalizados de operación basados en métodos reconocidos.
- Evaluación del impacto medioambiental de los procesos analíticos aplicados.
- Inclusión del enfoque multivariable de la Química Analítica.

2. Contexto

Este cambio debe verse reflejado en las prácticas de laboratorio. A grandes rasgos, y salvando todas las casuísticas y especificidades metodológicas que pudieran estar aplicándose, las prácticas de laboratorio en las diferentes asignaturas de Química Analítica se desarrollan en un marco genérico que puede condensarse en las siguientes etapas:

- 1) **ANTES DE LA SESIÓN.** Elaboración, por parte del profesor (o del equipo docente), de un documento descriptivo que se facilita previamente a los estudiantes.

Con diversas denominaciones, p. ej., Guion de Prácticas, Cuaderno de Prácticas (o similar), el documento expresa de forma resumida la **"información previamente conocida"**.

- 2) **DURANTE LA SESIÓN.** Se pueden considerar dos sub-etapas:

- 2.1) Descripción oral por parte del profesor del contexto y del procedimiento operatorio.

Esta información inicial incide de nuevo en la **"información previamente conocida"**, que ya está recogida en el documento previo y supone una reiteración, casi siempre necesaria. En cambio, la descripción de procedimiento operatorio se corresponde con la adquisición de la **"información no conocida pero accesible experimentalmente"**, y nuevamente reitera información recogida en el documento previo. Incluso es habitual incluir, en el documento inicial, tablas para recogida de datos primarios, y las ecuaciones para los cálculos.

- 2.2) Realización por parte de los estudiantes de las operaciones técnicas dirigidas a la adquisición de señales instrumentales, toma de datos, y obtención de resultados.

Supone la última fase de acceso a la **"información que se pretende conocer"**. Lleva implícita la realización de los cálculos, para calibración y cuantificación.

3) DESPUÉS DE LA SESIÓN. Revisión de los cálculos y evaluación de los resultados.

Esta etapa puede variar en la forma en la que se lleva a cabo, y puede centrarse en los datos experimentales, en el resultado numérico, o en ambos. A veces, como instrumento adicional de evaluación, se incorpora un cuestionario a resolver.

3. Propuesta

La inteligencia artificial generativa, accesible a los estudiantes (chatGPT, coPilot, Gemini, etc.), aporta un elemento clave que puede dinamizar la realización de las prácticas, y convertir a los estudiantes en protagonistas de las decisiones y sus resultados en el laboratorio.

Ello requiere una modificación organizativa, ya que es necesario que cada práctica se desarrolle en dos sesiones presenciales (aprox. 2,0-2,5 h cada una). Es una apuesta por la calidad, frente a la cantidad. Únicamente se plantea la **"información que se pretende conocer"**, y no se facilita ningún material previo. El grupo de estudiantes, de forma colaborativa, y bajo la tutorización del profesor, recopila la **"información previamente conocida"**, y la **"información no conocida, pero accesible experimentalmente"**, que deberán ser plasmadas en dos documentos elaborados *ad hoc* en formato normalizado: un informe técnico y un procedimiento de análisis, consistente con los requisitos de la norma ISO 17025. En la segunda sesión, se realizará el trabajo experimental conducente a la toma de datos y obtención de resultados, en línea con la metodología convencional.

No obstante, se puede ir más allá en la innovación, y utilizar la IA para programar los cálculos y validarlos de forma estructurada, en función de los requerimientos impuestos. Esta opción resulta casi imprescindible cuando se aplican métodos analíticos multivariables, basados en el modelado de la señal analítica completa. Igualmente puede programarse para calcular métricas de sostenibilidad ambiental (*greenness*) o de desempeño (*whiteness*) del método analítico aplicado.

4. Aplicación

En esta comunicación se presentará el desarrollo de esta propuesta en una práctica realizada para estudiantes de 3º del grado de Ingeniería Química de la Universidad de Granada, en el marco de la asignatura "Química Analítica Instrumental". La práctica tenía por objetivo determinar el perfil composicional de la aleación que conforma el estropajo denominado "NANAS níquel".



Figura 1. Envase comercial, y aspecto externo del material objeto de la práctica.

Los estudiantes interaccionaron con la IA para obtener información sobre: (i) composición de la aleaciones de níquel que pudieran presentarse en hilos con un color amarillento; (ii) establecimiento de una composición tipo; (iii) métodos analíticos para determinar la composición de una aleación recomendados en normas; (iv) selección de la técnica analítica a aplicar; (v) condiciones instrumentales para obtener un intervalo lineal para cada metal que permitan el establecimiento de calibrados univariantes suficientemente amplios; (vi) métodos de disolución del material; (vii) diluciones a aplicar, tanto a las disoluciones madre de los calibrantes como de la disolución de muestra para obtener disoluciones de ensayo consistentes entre sí, y con el intervalo lineal. En esta etapa es crítica la forma de hacer las preguntas, ya que la información ofrecida depende de ello.

Posteriormente, en una segunda sesión, se llevó a cabo la preparación de 5 disoluciones multipatrón para calibración, y de las disoluciones de muestra adaptadas a cada determinación, el ajuste y validación de las funciones de calibrado, y la predicción de las proporciones de cada metal en la aleación.

Los resultados de la experiencia serán mostrados, poniendo de manifiesto las dificultades encontradas, y sus conclusiones serán debatidas.