



Guía Docente				
Datos Identificativos				2013/14
Asignatura (*)	Química Analítica Avanzada e Quimiometría		Código	610G01015
Titulación	Grao en Química			
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuatrimestre	Cuarto	Obrigatoria	6
Idioma	CastelánInglés			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Analítica			
Coordinación	Lopez Mahia, Purificacion	Correo electrónico	purificacion.lopez.mahia@udc.es	
Profesorado	Andrade Garda, Jose Manuel	Correo electrónico	jose.manuel.andrade@udc.es	
	Lopez Mahia, Purificacion		purificacion.lopez.mahia@udc.es	
	Muniategui Lorenzo, Soledad		soledad.muniategui@udc.es	
Web	<a href="http://campusvirtual.udc.es">http://campusvirtual.udc.es</a>			
Descrición xeral	Asignatura que trata sobre la problemática del análisis de trazas y las metodologías de trabajo aplicables. Planificación y ejecución de las distintas etapas del proceso analítico para llevar a cabo el análisis de trazas. Ventajas de la automatización en este tipo de análisis. En esta materia se inicia al alumno en el conocimiento de los fundamentos de las principales herramientas quimiométricas aplicables tanto a calibración, diseño y optimización de experimentos y análisis multivariante de datos, tan necesarias en el mundo actual para resolver problemas analíticos concretos.			

Competencias da titulación	
Código	Competencias da titulación
A1	Utilizar a terminoloxía química, nomenclatura, convenios e unidades.
A7	Coñecer e aplicar as técnicas analíticas.
A14	Demostrar o coñecemento e comprensión de conceptos, principios e teorías relacionadas coa Química.
A15	Recoñecer e analizar novos problemas e planear estratexias para solucionarlos.
A16	Adquirir, avaliar e utilizar os datos e información bibliográfica e técnica relacionada coa Química.
A17	Traballar no laboratorio Químico con seguridade (manexo de materiais e eliminación de residuos).
A19	Levar a cabo procedementos estándares e manexar a instrumentación científica.
A20	Interpretar os datos procedentes de observacións e medidas no laboratorio.
A21	Comprender os aspectos cualitativos e cuantitativos dos problemas químicos.
A22	Planificar, deseñar e desenvolver proxectos e experimentos.
A23	Desenvolver unha actitude crítica de perfeccionamento na labor experimental.
A26	Levar a cabo procedementos estándares de laboratorios implicados en traballos analíticos e sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
B1	Aprender a aprender.
B2	Resolver problemas de forma efectiva.
B3	Aplicar un pensamento crítico, lóxico e creativo.
B4	Traballar de forma autónoma con iniciativa.
B5	Traballar de forma colaborativa.
B6	Comportarse con ética e responsabilidade social como cidadán e como profesional.
C1	Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma.
C3	Utilizar as ferramentas básicas das tecnoloxías da información e as comunicacións (TIC) necesarias para o exercicio da súa profesión e para a aprendizaxe ao longo da súa vida.
C4	Desenvolverse para o exercicio dunha cidadanía aberta, culta, crítica, comprometida, democrática e solidaria, capaz de analizar a realidade, diagnosticar problemas, formular e implantar solucións baseadas no coñecemento e orientadas ao ben común.
C6	Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben enfrontarse.
C7	Asumir como profesional e cidadán a importancia da aprendizaxe ao longo da vida.



C8	Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade.
----	---

Resultados da aprendizaxe			
Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe)	Competencias da titulación		
Saber planificar y ejecutar las distintas etapas del proceso analítico para el análisis de trazas. Saber discernir y elegir las metodologías de trabajo aplicables a cada problema.	A7 A15 A16 A17 A19 A20 A21 A22 A23 A26	B1 B2 B3 B4 B5 B6	C1 C3 C4 C6 C7 C8
Saber diferenciar los objetivos y aplicabilidad de las principales herramientas quimiométricas. Conocer los principios básicos de las metodologías quimiométricas básicas de calibración, diseño y optimización de experimentos y análisis multivariante de datos. Saber extraer información quimiométrica multivariable de un ejemplo sencillo relacionado con un estudio medioambiental.	A1 A7 A14 A15 A16 A20 A21 A22 A26	B1 B2 B4 B5	C1 C3 C4 C6

Contidos	
Temas	Subtemas
Tema 1. Introducción al análisis de trazas	Importancia del análisis de trazas y campos de aplicación. El proceso analítico en el análisis de trazas: requerimientos especiales. Importancia y requisitos básicos del muestreo. Estrategias de muestreo. Conservación y tratamiento de la muestra: fuentes de error. Aseguramiento de la calidad en el análisis de trazas.
Tema 2. Análisis de trazas inorgánicas	Introducción. Destrucción de matrices orgánicas. Descomposición y disolución de matrices inorgánicas. Procesos de separación y preconcentración en análisis de trazas inorgánicas. Especiación de elementos traza. Aplicaciones analíticas.
Tema 3. Análisis de trazas orgánicas	Introducción. Métodos de extracción de muestras sólidas. Métodos de extracción de muestras líquidas. Purificación, fraccionamiento y concentración de extractos orgánicos. Aplicaciones analíticas.
Tema 4. Automatización en el laboratorio analítico	Objetivos de la automatización. Ventajas y desventajas de la automatización. Clasificación de los sistemas analíticos automáticos. Robotización del laboratorio. Miniaturización. Análisis de procesos.
Tema 5. Introducción a la quimiometría	Definición de quimiometría. La quimiometría en el proceso analítico. Concepto de incertidumbre y cálculos básicos.
Tema 6. Inferencia estadística y calibración univariable	Test estadísticos de inferencia en los laboratorios analíticos: ensayos de hipótesis y análisis de varianza. Aplicaciones al laboratorio y al control de producción. Métodos de calibración. Calibración univariante por regresión lineal de mínimos cuadrados. Validación del modelo de calibración. Intervalos de confianza.



Tema 7. Diseño y optimización de experimentos	Diseño experimental: principios básicos. Tipos de diseños: diseños factoriales, diseños factoriales fraccionados y diseños Plackett-Burman. Optimización secuencial: método simplex. Diseños de superficie de respuesta.
Tema 8. Análisis multivariable de datos	Introducción. Clasificación de métodos de reconocimiento de pautas. Métodos no supervisados: análisis de agrupaciones, análisis de componentes principales. Métodos supervisados: método SIMCA, método del vecino más próximo (KNN).
Prácticas de laboratorio	El alumno llevará a cabo la aplicación de los conceptos teóricos desarrollados a lo largo del curso. Se presentan diferentes problemas reales (campo medioambiental, industrial, agroalimentario, clínico..) que los alumnos tendrán que resolver.

Planificación			
Metodoloxías / probas	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Prácticas de laboratorio	20	30	50
Seminario	6	12	18
Lecturas	1	2.5	3.5
Sesión maxistral	21	52.5	73.5
Proba obxectiva	3	0	3
Atención personalizada	2	0	2

\*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Prácticas de laboratorio	Se abordarán diferentes técnicas de pretratamiento de la muestra y de separación del analito necesarias antes de las determinaciones instrumentales (ej. cromatografía). Como trabajo inherente al desarrollo experimental se emplearán diferentes herramientas quimiométricas tanto en el proceso de calibración, diseño de experimentos y evaluación de parámetros de calidad analíticos. Al finalizar las prácticas el alumno entregará una memoria del trabajo realizado con un análisis crítico y detallado.
Seminario	Se remarcan aspectos esenciales de los temas tratados, resolución de boletines de ejercicios numéricos y cuestiones que el profesor habrá entregado previamente a los alumnos. Se realizarán ejercicios de intercomparación de los resultados obtenidos por diferentes procedimientos, esta revisión ayuda a entender la complejidad y dificultad de un análisis de trazas. Se realizará una aplicación de técnicas multivariantes de reconocimiento de pautas adecuadas para la interpretación de los datos medioambientales.
Lecturas	Se realizará lecturas seleccionadas por el profesor relacionadas con el análisis de trazas. Posteriormente el alumno deberá entregar un pequeño informe en el que identifique la estrategia seguida en la misma para la resolución del problema analítico.
Sesión maxistral	Sobre los contenidos más importantes del programa. Para un total aprovechamiento de las mismas, se recomienda que el alumno haya leído previamente los aspectos fundamentales del tema a tratar en los textos recomendados. Para la impartición de las mismas se emplearán medios audiovisuales y/o informáticos y se fomentará el diálogo para la correcta comprensión de los contenidos, la resolución de dudas y fomento del sentido crítico.
Proba obxectiva	Prueba escrita que se realiza en la convocatoria oficial de enero/julio en la que se evalúa el grado de aprendizaje y de adquisición de competencias por parte del alumno. Constará de preguntas teóricas como cuestiones aplicadas, resolución de problemas y contenidos prácticos. La fecha de realización está indicada en el calendario de exámenes del grado.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición



Lecturas Seminario Prácticas de laboratorio	La atención personalizada que se describe en relación a estas metodologías se conciben como momentos de trabajo presencial con el alumno, por lo que implican una participación obligatoria del mismo, bajo la supervisión del profesor, el cual resolverá dudas, organizará búsqueda bibliográfica, etc.  Habrán una sesión de aproximadamente media hora de duración de atención personalizada ligada a las tres metodologías descritas. Esta atención se realizará en el despacho del profesor.
---	--

Avaliación		
Metodoloxías	Descrición	Cualificación
Lecturas	Se valorará el informe detallado de las mismas en las que el alumno sepa identificar y justificar las estrategias seguidas en las mismas para la resolución de problemas analíticos.	5
Seminario	Se valorará la participación de los alumnos en los mismos, así como la resolución de las cuestiones, casos y/o problemas planteados por el profesor. Para alguno en concreto se realizará una breve exposición oral por parte del alumno.	10
Proba obxectiva	Se realizará un examen que consistirá en preguntas tipo test de respuesta única, preguntas de respuesta breve y problemas numéricos relacionados con contenidos teóricos y prácticos.	70
Prácticas de laboratorio	Se valorarán de forma continua tanto por el trabajo experimental (destreza, actitud, orden, atención) como por la memoria entregada. En la prueba objetiva se incluirán algunas preguntas relacionadas con las prácticas de laboratorio.	15

Observacións avaliación
<p>El trabajo del alumno será evaluado de forma continua y periódica a través de asistencia regular a las actividades evaluables, su participación en los trabajos de seminario, por la resolución de cuestiones y problemas planteados por el profesor (que tendrán que entregar resueltos en el plazo que se indique), por las prácticas de laboratorio (cuya realización es obligatoria) y por los exámenes escritos realizados. Al finalizar las prácticas deberán entregar un informe del procedimiento, resultados obtenidos e interpretación de los mismos.</p> <p>Para superar la asignatura es preciso obtener, tanto en la prueba objetiva como en el resto de actividades evaluables, una nota mínima de 4 (sobre 10) y alcanzar, sumadas las calificaciones de todas las actividades evaluables una nota mínima de 5 (sobre 10). Para que se tengan en cuenta las calificaciones en las distintas actividades sujetas a evaluación es preciso obtener la calificación mínima indicada anteriormente para cada una de ellas. De no alcanzarse dicha puntuación mínima en alguna de ellas, la asignatura figurará como suspensa (4).</p> <p>El alumno obtendrá la calificación de No Presentado cuando haya realizado menos del 25% de las actividades académicas programadas, y no se presente al examen final.</p> <p>En el contexto de "evaluación continuada" la "segunda oportunidad de julio" se entiende como una segunda oportunidad de realización de la prueba objetiva. Por tanto, para las prácticas, seminarios, lecturas&amp;nbsp;y trabajos tutelados,&amp;nbsp;&amp;nbsp;&amp;nbsp;se mantendrán las calificaciones obtenidas a lo largo del curso, mientras que la calificación de la prueba objetiva de&amp;nbsp;&amp;nbsp;&amp;nbsp;la segunda oportunidad&amp;nbsp;&amp;nbsp;sustituirá a la obtenida en la primera oportunidad.</p> <p>Los alumnos evaluados en la segunda oportunidad sólo podrán optar a matrícula de honor si el número máximo de éstas para el correspondiente curso no se han cubierto en su totalidad en la primera oportunidad.</p> <p>Por lo que se refiere a los sucesivos cursos académicos, el proceso de enseñanza-aprendizaje, incluida la evaluación, se refiere a un curso académico y, por lo tanto, volvería a comenzar con un nuevo curso, incluidas todas las actividades y procedimientos de evaluación que sean programadas para dicho curso.</p>

Fontes de información
-----------------------



<b>Bibliografía básica</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- KELLNER, R.; MERMET, J.M.; OTTO, M.; WIDMER, H.M. (1998). Analytical chemistry: a modern approach to analytical science. Weinheim, Wiley-VCH</li><li>- OTTO, M. (2007). Chemometrics. Weinheim, Wiley-VCH</li><li>- MILLER, J.N.; MILLER, J.C. (2002). Estadística y quimiometría para química analítica, 4th edition. Madrid, Prentice-Hall</li><li>- RAMIS, G.; GARCIA, M.C. (2001). Quimiometria. Madrid, Síntesis</li><li>- CAMARA, C.; FERNANDEZ, P.; MARTIN-ESTEBAN, A.; PEREZ-CONDE, C.; VIDAL, M. (2002). Toma y tratamiento de muestra. Madrid, Síntesis</li></ul>
<b>Bibliografía complementaria</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- VALCARCEL, M.; CARDENAS, M.S. (2000). Automatización y miniaturización en química analítica. Barcelona, Springer-Verlag</li></ul>

## Recomendacións

### Materias que se recomenda ter cursado previamente

Traballo de fin de Grao/610G01043

### Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Medio ambiente e calidade/610G01037

### Materias que continúan o temario

Química Analítica 1/610G01011

Química Analítica 2/610G01012

Química Analítica Instrumental 1/610G01013

Química Analítica Instrumental 2/610G01014

## Observacións

&lt;p&gt;Se recomienda: llevar al día la asignatura, realizar la preparación de las prácticas encomendadas de forma exhaustiva y &nbsp;aprovecharlas para aclarar dudas, conceptos, etc.; completar la formación teórica necesaria durante la ejecución de las prácticas, Intentar fomentar la capacidad de trabajar con ?criterio analítico? desde la primera a la última etapa del procedimiento analítico.&lt;p&gt;&lt;p&gt;Tener conocimientos de los métodos clásicos e instrumentales de análisis (volumetrías, gravimetrías, métodos de separación, técnicas electroanalíticas, ópticas y cromatográficas).&lt;p&gt;&lt;p&gt;Tener conocimientos de las herramientas informáticas (hojas de cálculo, procesador de textos, navegación ?internet?)&lt;p&gt;&lt;p&gt;Conocimientos básicos de inglés.&lt;p&gt;

(\*A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías