



Guía docente				
Datos Identificativos				2013/14
Asignatura (*)	Química Analítica Avanzada y Quimiometría		Código	610G01015
Titulación	Grao en Química			
Descriptorios				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Grado	1º cuatrimestre	Cuarto	Obligatoria	6
Idioma	CastellanoInglés			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Analítica			
Coordinador/a	Lopez Mahia, Purificacion	Correo electrónico	purificacion.lopez.mahia@udc.es	
Profesorado	Andrade Garda, Jose Manuel Lopez Mahia, Purificacion Muniategui Lorenzo, Soledad	Correo electrónico	jose.manuel.andrade@udc.es purificacion.lopez.mahia@udc.es soledad.muniategui@udc.es	
Web	<a href="http://campusvirtual.udc.es">http://campusvirtual.udc.es</a>			
Descripción general	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 de la titulación	
Código	Competencias de la titulación
A1	Utilizar la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
A7	Conocer y aplicar las técnicas analíticas.
A14	Demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
A15	Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos.
A16	Adquirir, evaluar y utilizar los datos e información bibliográfica y técnica relacionada con la Química.
A17	Trabajar en el laboratorio Químico con seguridad (manejo de materiales y eliminación de residuos).
A19	Llevar a cabo procedimientos estándares y manejar la instrumentación científica.
A20	Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio.
A21	Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.
A22	Planificar, diseñar y desarrollar proyectos y experimentos.
A23	Desarrollar una actitud crítica de perfeccionamiento en la labor experimental.
A26	Llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorios implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
B1	Aprender a aprender.
B2	Resolver un problema de forma efectiva.
B3	Aplicar un pensamiento crítico, lógico y creativo.
B4	Trabajar de forma autónoma con iniciativa.
B5	Trabajar de forma colaborativa.
B6	Comportarse con ética y responsabilidad social como ciudadano y como profesional.
C1	Expresarse correctamente, tanto de forma oral como escrita, en las lenguas oficiales de la comunidad autónoma.
C3	Utilizar las herramientas básicas de las tecnologías de la información y las comunicaciones (TIC) necesarias para el ejercicio de su profesión y para el aprendizaje a lo largo de su vida.
C4	Desarrollarse para el ejercicio de una ciudadanía abierta, culta, crítica, comprometida, democrática y solidaria, capaz de analizar la realidad, diagnosticar problemas, formular e implantar soluciones basadas en el conocimiento y orientadas al bien común.
C6	Valorar críticamente el conocimiento, la tecnología y la información disponible para resolver los problemas con los que deben enfrentarse.
C7	Asumir como profesional y ciudadano la importancia del aprendizaje a lo largo de la vida.



C8	Valorar la importancia que tiene la investigación, la innovación y el desarrollo tecnológico en el avance socioeconómico y cultural de la sociedad.
----	---

Resultados de aprendizaje			
Competencias de materia (Resultados de aprendizaje)	Competencias de la 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

Contenidos	
Tema	Subtema
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			
Metodologías / pruebas	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Prácticas de laboratorio	20	30	50
Seminario	6	12	18
Lecturas	1	2.5	3.5
Sesión magistral	21	52.5	73.5
Prueba objetiva	3	0	3
Atención personalizada	2	0	2

(\*)Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos

Metodologías	
Metodologías	Descripción
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 magistral	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.
Prueba objetiva	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	
Metodologías	Descripción



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.
---	--

Evaluación		
Metodologías	Descripción	Calificación
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
Prueba objetiva	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

Observaciones evaluación
<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>

Fuentes de información
------------------------



<b>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, Sintesis</li><li>- CAMARA, C.; FERNANDEZ, P.; MARTIN-ESTEBAN, A.; PEREZ-CONDE, C.; VIDAL, M. (2002). Toma y tratamiento de muestra. Madrid, Sintesis</li></ul>
<b>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>

## Recomendaciones

### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Trabajo de fin de Grado/610G01043

### Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Medio ambiente y calidad/610G01037

### Asignaturas que continúan el temario

Química Analítica 1/610G01011

Química Analítica 2/610G01012

Química Analítica Instrumental 1/610G01013

Química Analítica Instrumental 2/610G01014

### Otros comentarios

&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;

(\*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías