



Guía docente				
Datos Identificativos				2015/16
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			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Analítica			
Coordinador/a	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	
	Rodríguez González, Noelia		noelia.rodriquez.gonzalez@udc.es	
	Salgueiro González, Noelia		n.salgueiro@udc.es	
Web	http://campusvirtual.udc.es			
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 del título	
Código	Competencias del título
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.
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.
C2	Dominar la expresión y la comprensión de forma oral y escrita de un idioma extranjero.
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.
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			
Resultados de aprendizaje	Competencias del título		
Saber discernir y elegir las metodologías de trabajo aplicables a cada problema	A15 A16 A20 A22 A26	B3	C4 C6 C8
Saber planificar y ejecutar las distintas etapas del proceso analítico para el análisis de trazas, incluyendo la interpretación de los datos obtenidos.	A14 A17 A19 A20 A21 A23	B2 B4	C3
Saber diferenciar los objetivos y aplicabilidad de las principales herramientas quimiométricas. Saber extraer información quimiométrica multivariable de un ejemplo sencillo relacionado con un estudio medioambiental.	A14 A15 A16 A20 A26	B2 B4 B5	C2 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	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Prácticas de laboratorio	A23 A22 A21 A20 A19 A17 A16 A15 A26 B3 B4 B5	20	30	50
Seminario	A15 A16 A20 A21 B2 B3 B4 C3	6	12	18
Lecturas	C4 C6 C8	1	2.5	3.5
Sesión magistral	A15 A16 A21 A22 C4	21	52.5	73.5
Prueba mixta	A14 A15 C2	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 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 e detallado.
Seminario	Se remarcarán los aspectos esenciales de los temas tratados, resolución de boletines de ejercicios numéricos y cuestiones que el profesor entregará previamente a los estudiantes. 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 lectura/s seleccionada/s por el profesor relacionadas con el análisis de trazas. Posteriormente el estudiante deberá entregar un pequeño informe en el que identifique y resuma la estrategia seguida 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 estudiante lea 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 mixta	Prueba escrita que se realiza na convocatoria oficial de enero/xullo na que se evalúa o grao de aprendizaxe e de adquisición de competencias por parte do estudante. Constará tanto de preguntas teóricas como cuestións aplicadas, resolución de problemas e contidos prácticos. A data de realización indicárase no calendario de exames do grado.

Atención personalizada	
Metodologías	Descripción
Lecturas Seminario Prácticas de laboratorio	La atención personalizada que se describe en relación con estas metodologías se ideó como momentos de trabajo presencial con el estudiante, por lo que implica una participación obligatoria del mismo bajo la supervisión del profesor, el cuál resolverá dudas, organizará búsqueda bibliográfica, etc. Habrá 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	Competencias	Descripción	Calificación
Lecturas	C4 C6 C8	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	A15 A16 A20 A21 B2 B3 B4 C3	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
Prácticas de laboratorio	A23 A22 A21 A20 A19 A17 A16 A15 A26 B3 B4 B5	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
Prueba mixta	A14 A15 C2	Se realizará un examen que consistirá en preguntas tipo test de respuesta única, preguntas de respuesta breve y problemas numéricos relacionados con los contenidos teóricos y prácticos.	70

Observaciones evaluación

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.

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). La asignatura no será aprobada (incluso en el caso de que la suma total supere 5) si la

puntuación de una de las actividades evaluables no alcanza el 4. En este caso, la puntuación final de la asignatura será suspenso (4).

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.

En el contexto de "evaluación continuada" la "segunda oportunidad de julio" se entiende como una segunda oportunidad de realización de la prueba mixta. Por tanto, para las prácticas, seminarios, lecturas y trabajos tutelados, se mantendrán las calificaciones obtenidas a lo largo del curso, mientras que la calificación de la prueba objetiva de la segunda oportunidad sustituirá a la obtenida en la primera oportunidad.

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.

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.

Fuentes de información

Básica	<ul style="list-style-type: none">- CAMARA, C.; FERNANDEZ, P.; MARTIN-ESTEBAN, A.; PEREZ-CONDE, C.; VIDAL, M. (2002). Toma y tratamiento de muestra. Madrid, Síntesis- MILLER, J.N.; MILLER, J.C. (2002). Estadística y quimiometría para química analítica, 4th edition. Madrid, Prentice-Hall- RAMIS, G.; GARCIA, M.C. (2001). Quimiometría. Madrid, Síntesis- CaMARA, C.; PEREZ-CONDE, C. (2011). Análisis químico de trazas. Madrid, Síntesis
Complementaria	<ul style="list-style-type: none">- VALCARCEL, M.; CARDENAS, M.S. (2000). Automatización y miniaturización en química analítica. Barcelona, Springer-Verlag- KELLNER, R.; MERMET, J.M.; OTTO, M.; WIDMER, H.M. (1998). Analytical chemistry: a modern approach to analytical science. Weinheim, Wiley-VCH- OTTO, M. (2007). Chemometrics. Weinheim, Wiley-VCH



Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Química Analítica 1/610G01011

Química Analítica 2/610G01012

Química Analítica Instrumental 1/610G01013

Química Analítica Instrumental 2/610G01014

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Medio ambiente y calidad/610G01037

Asignaturas que continúan el temario

Trabajo de fin de Grado/610G01043

Otros comentarios

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

(*) 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