



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|---|--------------------|--|-----------|
| Datos Identificativos | | | | 2016/17 |
| 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 | | | |
| Modalidade docente | Presencial | | | |
| Prerrequisitos | | | | |
| Departamento | Química Analítica | | | |
| Coordinación | Lopez Mahia, Purificacion | Correo electrónico | purificacion.lopez.mahia@udc.es | |
| Profesorado | Andrade Garda, Jose Manuel Fernández Amado, María Lopez Mahia, Purificacion Muniategui Lorenzo, Soledad | Correo electrónico | jose.manuel.andrade@udc.es maria.fernandez.amado@udc.es purificacion.lopez.mahia@udc.es soledad.muniategui@udc.es | |
| Web | http://campusvirtual.udc.es | | | |
| Descrición xeral | Asignatura que trata sobre a problemática da análise de trazas e as metodoloxías de traballo aplicables. Planificación e execución das distintas etapas do proceso analítico para facer a análise de trazas. Vantaxes da automatización neste tipo de análise. Nesta materia iniciase ao alumno no coñecemento dos fundamentos das principais ferramentas quimiométricas aplicables tanto á calibración, deseño e optimización de experimentos e análise multivariante de datos, tan necesarias no mundo actual para resolver problemas analíticos concretos. | | | |

| Competencias / Resultados do título | |
|-------------------------------------|--|
| Código | Competencias / Resultados do título |
| 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. |
| 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. |
| C2 | Dominar a expresión e a comprensión de forma oral e escrita dun idioma estranxeiro. |
| 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. |
| C8 | Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade. |



| Resultados da aprendizaxe | | | |
|---|--|----------------|----------------------|
| Resultados de aprendizaxe | Competencias / Resultados do título | | |
| Saber discernir e eleixir as metodoloxías de traballo aplicables a cada problema. | A15 A16 A20 A22 A26 | B3 | C4 C6 C8 |
| Saber planificar e executar as distintas etapas do proceso analítico para o análise de trazas, xunto coa interpretación dos datos obtidos. | A14 A17 A19 A20 A21 A23 | B2 B4 | C3 |
| Saber diferenciar os obxetivos e aplicabilidade das principais ferramentas quimiométricas. Saber extraer información quimiométrica multivariable dun exemplo sinxelo relacionado cun estudo medioambiental. | A14 A15 A16 A20 A26 | B2 B4 B5 | C2 C3 C4 C6 |

| Contidos | |
|--|--|
| Temas | Subtemas |
| Tema 1. Introducción ao análise de trazas | Importancia da análise de trazas e campos de aplicación. O proceso analítico na análise de trazas: requerimentos especiais. Importancia e requisitos básicos da mostraxe. Estratexias de mostraxe. Conservación e tratamento da mostra: fontes de erro. Aseguramento da calidade na análise de trazas. |
| Tema 2. Análisis de trazas inorgánicas | Introducción. Destrucción de matrices orgánicas. Descomposición e disolución de matrices inorgánicas. Procesos de separación e preconcentración en análise de trazas inorgánicas. Especiación de elementos traza. Aplicacións analíticas. |
| Tema 3. Análisis de trazas orgánicas | Introducción. Métodos de extracción de mostras sólidas. Métodos de extracción de mostras líquidas. Purificación, fraccionamento e concentración de extractos orgánicos. Aplicacións analíticas. |
| Tema 4. Automatización no laboratorio analítico | Obxectivos da automatización. Ventaxas e desvantaxas da automatización. Clasificación dos sistemas analíticos automáticos. Robotización do laboratorio. Miniaturización. Análisis de procesos. |
| Tema 5. Introducción á quimiometría | Definición de quimiometría. A quimiometría no proceso analítico. Concepto de incertidume e cálculos básicos. |
| Tema 6. Inferencia estatística e calibración univariable | Test estatísticos de inferencia nos laboratorios analíticos: tests de hipóteses e análise da varianza. Aplicacións ao laboratorio e a control de produción. Métodos de calibración. Calibración univariante por regresión lineal de mínimos cuadrados. Validación do modelo de calibración. Intervalos de confianza. |
| Tema 7. Deseño e optimización de experimentos | Deseño experimental: principios básicos. Tipos de deseños: deseños factoriais, deseños factoriais fraccionados e deseños Plackett-Burman. Optimización secuencial: método simplex. Deseños de superficie de resposta. |
| Tema 8. Análisis multivariable de datos | Introducción. Clasificación de métodos de recoñecemento de pautas. Métodos non supervisados: análise de agrupacións, análise de compoñentes principais. Métodos supervisados: método SIMCA, método do veciño máis próximo (KNN). |
| Prácticas de laboratorio | O estudante aplicará os conceptos teóricos desenvolvidos ao longo do curso. Preséntanse diferentes problemas reais (campo medioambiental, industrial, agroalimentario, clínico..) que os estudantes terán que resolver. |



Planificación

| Metodoloxías / probas | Competencias / Resultados | Horas lectivas (presenciais e virtuais) | Horas traballo autónomo | Horas totais |
|--------------------------|--|---|-------------------------|--------------|
| Prácticas de laboratorio | A15 A16 A17 A19 A20 A21 A22 A23 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 maxistral | A15 A16 A21 A22 C4 | 21 | 52.5 | 73.5 |
| Proba mixta | A14 A15 C2 | 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 | Abordaranse diferentes técnicas de pretratamiento da mostra e de separación do analito necesarias antes das determinacións instrumentais (ex. cromatografía). Como traballo inherente ao desenvolvemento experimental empregaranse diferentes ferramentas quimiométricas tanto no proceso de calibración, deseño de experimentos e avaliación de parámetros de calidade analíticos. Ao finalizar as prácticas o estudante entregará unha memoria do traballo realizado cun análise crítico e detallado. |
| Seminario | Remárcanse aspectos esenciais dos temas tratados, resolución de boletíns de exercicios numéricos e cuestións que o profesor entregará previamente aos estudantes. Realizaránse exercicios de intercomparación dos resultados obtidos por diferentes procedementos, esta revisión axuda a entender a complexidade e dificultade dun análise de trazas. Realizarase unha aplicación de técnicas multivariantes de recoñecemento de pautas adecuadas para a interpretación dos datos medioambientais. |
| Lecturas | Realizaranse lectura/s seleccionada/s polo profesor relacionadas co análise de trazas. Posteriormente o estudante deberá entregar un pequeno informe no que identifique e resuma a estratexia seguida para a resolución do problema analítico. |
| Sesión maxistral | Acerca dos contidos máis importante do programa. Para un total aproveitamento das mesmas, recoméndase que o estudante lea previamente os aspectos fundamentais do tema a tratar nos textos recomendados. Para a impartición das mesmas empregaranse medios audiovisuais e/o informáticos e fomentárase o diálogo para a correcta comprensión dos contidos, a resolución de dúbidas e fomento do sentido crítico. |
| Proba mixta | Proba 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

| Metodoloxías | Descrición |
|---|---|
| Lecturas Seminario Prácticas de laboratorio | A atención personalizada que se describe en relación con estas metodoloxías ideouse como momentos de traballo presencial co estudante, polo que implica unha participación obrigatoria do mesmo baixo a supervisión do profesor, o cal resolverá dúbidas, organizará procura bibliográfica, etc. A atención personalizada tamén inclúe o réxime xeral de titorías. O alumno con recoñecemento de adicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia será atendido en réxime de horas de titorías (previa cita). |

Avaliación



| Metodoloxías | Competencias / Resultados | Descrición | Cualificación |
|--------------------------|--|---|---------------|
| Lecturas | C4 C6 C8 | Valorarase o informe detallado das mesmas, no que o estudante debe identificar e xustificar as estratexias seguidas nas mesmas para a resolución dos problemas analíticos. | 5 |
| Seminario | A15 A16 A20 A21 B2 B3 B4 C3 | Valorarase a participación dos estudantes neles, ademais da resolución das cuestións, casos e/ou problemas plantexados polo profesor. | 10 |
| Prácticas de laboratorio | A15 A16 A17 A19 A20 A21 A22 A23 A26 B3 B4 B5 | Valorarase tanto polo traballo experimental (destreza, actitude, orde, atención, interpretación dos resultados obtidos) como pola elaboración do diario de laboratorio. | 15 |
| Proba mixta | A14 A15 C2 | Realizarase un exame que consistirá en preguntas tipo test de resposta única, preguntas de resposta breve e problemas numéricos relacionados cos contidos teóricos. Na proba obxectiva inclúiranse algunhas preguntas relacionadas coas prácticas de laboratorio. | 70 |

Observacións avaliación

O traballo do alumno será avaliado de forma continua a través da asistencia ás actividades avaliadas, a súa participación nos traballos de seminario, a resolución de cuestións e problemas numéricos, informe das lecturas, prácticas de laboratorio e pola proba mixta.

A realización das prácticas é obrigatoria e a súa non realización impide a superación da materia.

Para superar a materia é preciso obter, tanto na proba mixta como no resto de actividades avaliadas, unha nota mínima de 4 (sobre 10) e alcanzar, sumadas as cualificacións de todas as actividades avaliadas unha nota mínima de 5 (sobre 10). A materia non será aprobada (mesmo no caso de que a suma total supere 5) se a puntuación dunha das actividades avaliadas non alcanza o 4; neste caso a puntuación final da materia será suspenso (4,5).

A proba mixta consistirá en dúas partes: cuestións teóricas e exercicios numéricos, cada unha das cales deberá ser superada.

O alumno obterá a cualificación de Non Presentado cando non realice nin as prácticas de laboratorio nin a proba mixta.

No contexto de "avaliación continuada" a "segunda oportunidade" enténdese como unha segunda oportunidade de realización da proba mixta. Por tanto, para as prácticas, seminarios, lecturas, manteranse as cualificacións obtidas ao longo do curso, mentres que a cualificación da proba mixta da segunda oportunidade substituirá á obtida na primeira oportunidade.

Os alumnos avaliados na segunda oportunidade só poderán optar a matrícula de honra se o número máximo destas para o correspondente curso non se cubren na súa totalidade na primeira oportunidade.

Polo que se refire aos sucesivos cursos académicos, o proceso de ensino-aprendizaxe, *incluída a avaliación, refírese a un curso académico e, por tanto, volvería comezar cun novo curso, *incluídas todas as actividades e procedementos de avaliación que sexan programadas para o devandito curso.

O alumno con recoñecemento de dedicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia será avaliado unicamente mediante as cualificacións obtidas na proba mixta (80%), lecturas (5%) e nas prácticas (15%). A realización das prácticas facilitarase dentro da flexibilidade que permitan os horarios de coordinación e os recursos materiais e humanos. Isto aplica a ambas as oportunidades.

Fontes de información

| | |
|------------------------------------|--|
| Bibliografía 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, Sintesis - MILLER, J.N.; MILLER, J.C. (2002). Estadística y quimiometría para química analítica, 4th edition. Madrid, Prentice-Hall - RAMIS, G.; GARCIA, M.C. (2001). Quimiometria. Madrid, Sintesis - CaMARA, C.; PEREZ-CONDE, C (2011). Análisis químico de trazas. Madrid, Sintesis |
| Bibliografía 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. Winheim, Willey-VCH - OTTO, M. (2007). Chemometrics. Weingeim, Willey-VCH |



Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Química Analítica 1/610G01011

Química Analítica 2/610G01012

Química Analítica Instrumental 1/610G01013

Química Analítica Instrumental 2/610G01014

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Medio ambiente e calidade/610G01037

Materias que continúan o temario

Traballo de fin de Grao/610G01043

Observacións

Recomendamos levar a materia ao día, facer unha boa preparación das prácticas e utilizalas para responder a preguntas, conceptos e completar a formación teórica necesaria. Tratar de construír a capacidade de traballar con "visión analítica" da primeira á última fase do proceso de análise. Ter coñecemento de métodos clásicos e instrumentais de análise (titulacións, gravimetrías, métodos de separación, técnicas electroanalíticas, óptica e cromatográfica). Ter coñecemento de ferramentas de informática (follas de cálculo, procesamento de texto, navegación en "internet"). Coñecementos básicos de inglés.

(*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