



## Teaching Guide

Identifying Data					2017/18
Subject (*)	Química Analítica Avanzada	Code	610311502		
Study programme	Licenciado en Química				
Descriptors					
Cycle	Period	Year	Type	Credits	
First and Second Cycle	Yearly	Fifth	Troncal	8	
Language	SpanishGalician				
Teaching method	Face-to-face				
Prerequisites					
Department	Química				
Coordinador		E-mail			
Lecturers		E-mail			
Web					
General description	O obxectivo da materia e contribuir a desenvolver no estudante o criterio analítico; para a resolución dos problemas que se lle presenten, especialmente relacionados co análise de trazas, seleccionando a metodoloxía mais adecuada en cada caso, e tendo en conta a importancia da calidade dos resultados analíticos.				

## Study programme competences / results

Code	Study programme competences / results
A7	Coñecer e aplicar as técnicas analíticas.
A15	Recoñecer e analizar novos problemas e planear estratexias para solucionarlos.
A17	Traballar no laboratorio Químico con seguridade (manexo de materiais e eliminación de residuos).
A18	Valorar os riscos no uso de sustancias químicas e procedementos de laboratorio.
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.
B6	Comportarse con ética e responsabilidade social como cidadán e como profesional.
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.

## Learning outcomes

Learning outcomes	Study programme competences / results		
Capacidad de análisis y resolución de problemas químicos de distinta naturaleza (medioambiental, industrial, etc.) en base a criterios analíticos	A15 A20 A21	B1 B2 B4	C8
Planificación y ejecución de las distintas etapas del proceso analítico	A7 A22	B1 B3 B4	C6



Selección, manejo, aplicación e interpretación de técnicas instrumentales de análise	A7 A19 A20 A23 A26	B1 B2 B3	C6
- Seleccionar e implementar buenas prácticas científicas de medida y experimentación.	A7 A17 A18 A23	B1 B3 B6	C8
- Interpretación de datos e información química procedentes de observaciones y medidas.	A20 A21	B1 B2 B3	C6
- Asegurar la calidad de los datos químicos.	A20 A21	B1 B6	C6
- Obtener información cualitativa y cuantitativa necesaria para resolver problemas analíticos.	A21	B1 B2 B4	C6

Contents	
Topic	Sub-topic
Tema 1.- LA QUIMIOMETRÍA EN EL PROCESO ANALÍTICO	Introducción a la Quimiometría. Ensayos de hipótesis. Errores. Rechazo de resultados. Análisis de varianza (ANOVA). Introducción a los ensayos interlaboratorio. Cartas de control.
Tema 2.- CALIBRACIÓN UNIVARIANTE	Definición. Selección del modelo de calibrado. Intervalos de confianza. Límites de detección y cuantificación. Procedimientos de regresión robusta.
Tema 3.- DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE EXPERIMENTOS	Diseños completos y factoriales. Introducción a la optimización, método simplex.
Tema 4.- ANÁLISIS MULTIVARIANTE DE DATOS	Introducción al análisis multivariante. Niveles de reconocimiento de pautas. Pretratamiento de los datos. Análisis de componentes principales. Métodos de agrupación y clasificación. Introducción a los modelos de regresión multivariante.
Tema 5.- INTRODUCCIÓN AL ANÁLISIS DE TRAZAS	Definición, importancia y campos de aplicación del análisis de trazas. Fuentes de contaminación de la muestra y su control (almacenamiento; material de laboratorio; reactivos)
Tema 6.- ASEGURAMIENTO DE CALIDAD EN EL ANÁLISIS DE TRAZAS	La calidad en los laboratorios analíticos. Trazabilidad en el análisis. Materiales de referencia. Validación del método analítico. Métodos de cuantificación
Tema 7.- OPERACIONES PREVIAS Y TRATAMIENTO DE LA MUESTRA EN EL ANÁLISIS DE TRAZAS	Importancia y requisitos básicos del muestreo. Estrategias de muestreo. Conservación y tratamiento de la muestra: Fuentes de error. Operaciones previas adecuadas al análisis de trazas. Analitos inorgánicos: Métodos de destrucción de matrices orgánicas y disolución de matrices inorgánicas; métodos de separación y preconcentración. Analitos orgánicos: Métodos de extracción; métodos de preconcentración, purificación y fraccionamiento. Especiación: Definiciones y tipos de especiación. Metodologías de especiación. Aplicaciones analíticas.
Tema 8.- TÉCNICAS CROMATOGRÁFICAS EN EL ANÁLISIS DE TRAZAS	Cromatografía de gases (GC) en el análisis de trazas: Fundamento, instrumentación, estudio de las condiciones experimentales, aplicaciones. Cromatografía de líquidos de alta resolución (HPLC) en el análisis de trazas: Fundamento, instrumentación, estudio de las condiciones experimentales, aplicaciones. Electroforesis capilar (CE): Fundamento, instrumentación, tipos y aplicaciones. Técnicas instrumentales híbridas: Cromatografía de gases acoplada a la espectrometría de masas (GC/MS); Cromatografía de líquidos de alta resolución acoplada a la espectrometría de masas (HPLC/MS).



Tema 9.- TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS EN EL ANÁLISIS DE TRAZAS	Espectroscopía de absorción atómica con atomización electrotérmica (ETAAS): Fundamento, instrumentación, sistemas de corrección de interferencias, análisis directo de sólidos y suspensiones, aplicación al análisis de trazas. Espectroscopía de absorción atómica con generación de hidruros (HGAAS) y con vapor frío (CVAAS): Fundamento, instrumentación, aplicación al análisis de trazas. Espectroscopía de emisión atómica con plasma de argón acoplado por inducción (ICP-AES): Fundamento, instrumentación, interferencias, aplicaciones al análisis de trazas. Espectrometría de masas con plasma de acoplamiento inductivo (ICP/MS). Fluorescencia y Difracción de Rayos X: Fundamento, instrumentación y aplicaciones en el análisis de trazas. Otras técnicas espectroscópicas y no espectroscópicas.
Tema 10.- MÉTODOS CINÉTICOS DE ANÁLISIS	Clasificación de los métodos cinéticos de análisis. Componentes básicos de la instrumentación. Métodos cinéticos no catalíticos, catalíticos no enzimáticos y métodos enzimáticos. Métodos de Inmunoanálisis: Fundamentos y técnicas de inmunoensayo. Aplicaciones analíticas.
Tema 11.- ASPECTOS GENERALES DE LA AUTOMATIZACIÓN EN EL LABORATORIO ANALÍTICO	Objetivos de la automatización en el laboratorio. Grados de automatización. Ventajas e inconvenientes. Características y tipos de sensores químicos. Biosensores. Sistemas continuos de análisis: Análisis por inyección en flujo (FIA): Fundamentos, instrumentación, operaciones básicas y aplicaciones. Fundamentos del análisis por inyección secuencial (SIA). Instrumentación y aplicaciones.
Tema 12.- MÉTODOS DE ANÁLISIS AUTOMÁTICOS Y AUTOMATIZADOS	Preparación de la muestra. Sistemas controlados por ordenador Química Analítica de procesos: Control de procesos industriales en línea. Miniaturización de procesos químico-analíticos. Robots en el laboratorio: Componentes, características y clasificación. Limitaciones y aplicaciones.
Tema 13.- SISTEMAS DE GESTIÓN DE INFORMACIÓN EN EL LABORATORIO	Introducción a los sistemas de gestión de la información en el laboratorio (LIMS). Flujos de información en el laboratorio. El LIMS dentro del sistema de calidad. Fuentes de error en los LIMS. Auditorias.

Planning				
Methodologies / tests	Competencies / Results	Teaching hours (in-person & virtual)	Student's personal work hours	Total hours
Mixed objective/subjective test		3	196	199
Personalized attention		1	0	1

(\*The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Methodologies	
Methodologies	Description
Mixed objective/subjective test	O exame constará de preguntas curtas, de preguntas de resposta razoada e tipo test. Inclue tamén a resolución dun problema relacionado coas clases prácticas.

Personalized attention	
Methodologies	Description
Mixed objective/subjective test	O profesor resolverá todas as dudas que lle plantexen os alumnos.

Assessment			
Methodologies	Competencies / Results	Description	Qualification



Mixed objective/subjective test		A proba mixta consistirá en preguntas sobre os aspectos teóricos e na resolución de problemas numéricos.	100
Others			

### Assessment comments

### Sources of information

<b>Basic</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- J.N. MILLER, J.C. MILLER (2002). Estadística y Quimiometría para Química Analítica. Pearson Education, Madrid</li> <li>- R.COMPAÑÓ BELTRÁN, A. RÍOS CASTRO (2002). Garantía de calidad en los laboratorios analíticos. Síntesis, Madrid</li> <li>- C. CÁMARA (ED.), P. FERNÁNDEZ, A. MARTÍN-ESTEBAN, C. PÉREZ-CONDE, M. VIDAL (2002). Toma y tratamiento de muestra. Síntesis, Madrid</li> <li>- D.A. SKOOG, F.J. HOLLER, T.A. NIEMAN (2001). Principios de Análisis Instrumental. McGraw Hill, Madrid</li> <li>- M. VALCÁRCEL (1999). Principios de Química Analítica. Ed. Springer-Verlag</li> <li>- G. RAMIS RAMOS, MC. GARCÍA ÁLVAREZ-COQUE (2001). Quimiometría. Editorial Síntesis.Madrid</li> <li>- Edits. C. Cámara, C. Pérez Conde (2010). Análisis Químico de Trazas. Editorial Síntesis.Madrid</li> </ul>
<b>Complementary</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- M. VALCÁRCEL, M.D. LUQUE DE CASTRO (1988). Automatic methods of analysis. Elsevier</li> <li>- M.D. PÉREZ BENDITO, M. VALCÁRCEL (Eds.) (1984). Métodos Cinéticos de Análisis. M.P.C.A. Universidad de Córdoba, Córdoba</li> <li>- R. KELLNER, J.M. MERMET, M.OTTO, H.M. WIDMER (1998). Analytical Chemistry. Wiley-VCH, Weinheim</li> <li>- F.W. FIFIELD, P.J. HAINES (Eds.) (1996). Environmental Analytical Chemistry. Blackie Academic &amp;amp; Professional, Glasgow</li> <li>- E. PRICHARD (Ed.) (1996). Trace Analysis: A structured approach to obtaining reliable results. Royal Society of Chemistry, Cambridge</li> <li>- B. MARKERT (Ed.) (1994). Environmental Sampling for Trace Analysis. VCH Publishers, Weinheim</li> <li>- A.G. HOWARD, P.J. STATHAM (1997). Inorganic Trace Analysis. Philosophy and Practice. John Wiley &amp;amp; Sons, Chichester</li> <li>- L.H.J. LAJUNEN (1992). Spectrochemical Analysis by Atomic Absorption and Emission. The Royal Society of Chemistry, Cambridge</li> <li>- R. CELA, R.A. LORENZO, M.C. CASAIS (2002). Técnicas de separación en Química Analítica. Síntesis, Madrid</li> <li>- F.G. KITSON, B.S. LARSEN, C.N. McEWEN (1996). Gas Chromatography and Mass Spectrometry: A Practical Guide. Academic Press, San Diego</li> <li>- L.R. SNYDER, J.J. KIRKLAND, J.L. GLAJCH (1997). Practical HPLC Method Development. John Wiley &amp;amp; Sons, New York</li> <li>- Ph. QUEVAUVILLER, E.A. MAIER, B. GRIEPINK (Eds.) (1995). Quality Assurance for Environmental Analysis, vol.17. Elsevier, Amsterdam</li> <li>- A.M. URE, C.M. DAVIDSON (1995). Chemical Speciation in the Environment. Blackie Academic &amp;amp; Professional, Glasgow</li> <li>- R. CELA (Ed.) (1994). Avances en Quimiometría Práctica. Servicio de Publicaciones e Intercambio Científico. Universidad Santiago de Compostela</li> </ul>

### Recommendations

#### Subjects that it is recommended to have taken before

Técnicas Analíticas Instrumentais en Medio Ambiente/610311615

#### Subjects that are recommended to be taken simultaneously

#### Subjects that continue the syllabus



Other comments

(\*)The teaching guide is the document in which the URV publishes the information about all its courses. It is a public document and cannot be modified. Only in exceptional cases can it be revised by the competent agent or duly revised so that it is in line with current legislation.