



| Teaching Guide         |  |        |           |         |
|------------------------|--|--------|-----------|---------|
| Identifying Data       |  |        |           | 2021/22 |
| Subject (*)            | Química Analítica Avanzada   | Code   | 610311502 |         |
| Study programme        | Licenciado en Química  |        |           |         |
| Descriptors            |  |        |           |         |
| Cycle                  | Period   | Year   | Type      | Credits |
| First and Second Cycle | Yearly   | Fifth  | Trunk     | 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.                                |        |           |         |
| Contingency plan       | 1. Modifications to the contents<br><br>2. Methodologies<br>*Teaching methodologies that are maintained<br><br>*Teaching methodologies that are modified<br><br>3. Mechanisms for personalized attention to students<br><br>4. Modifications in the evaluation<br><br>*Evaluation observations:<br><br>5. Modifications to the bibliography or webgraphy |        |           |         |

| Study programme competences |  |
|-----------------------------|--|
| Code                        | Study programme competences  |
| 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 afrontarse.              |
| 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    |                |    |
| Capacidad de análisis y resolución de problemas químicos de distinta naturaleza (medioambiental, industrial, etc.) en base a criterios analíticos | A15<br>A20<br>A21              | B1<br>B2<br>B4 | C8 |
| Planificación y ejecución de las distintas etapas del proceso analítico   | A7<br>A22                      | B1<br>B3<br>B4 | C6 |
| Selección, manejo, aplicación e interpretación de técnicas instrumentales de análisis   | A7<br>A19<br>A20<br>A23<br>A26 | B1<br>B2<br>B3 | C6 |
| - Seleccionar e implementar buenas prácticas científicas de medida y experimentación.   | A7<br>A17<br>A18<br>A23        | B1<br>B3<br>B6 | C8 |
| - Interpretación de datos e información química procedentes de observaciones y medidas.   | A20<br>A21                     | B1<br>B2<br>B3 | C6 |
| - Asegurar la calidad de los datos químicos.  | A20<br>A21                     | B1<br>B6       | C6 |
| - Obtener información cualitativa y cuantitativa necesaria para resolver problemas analíticos.  | A21                            | B1<br>B2<br>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 | <p>Importancia y requisitos básicos del muestreo. Estrategias de muestreo.</p> <p>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.</p>   |
| Tema 8.- TÉCNICAS CROMATOGRÁFICAS EN EL ANÁLISIS DE TRAZAS                        | <p>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).</p>   |
| Tema 9.- TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS EN EL ANÁLISIS DE TRAZAS                       | <p>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.</p> |
| Tema 10.- MÉTODOS CINÉTICOS DE ANÁLISIS   | <p>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.</p>  |
| Tema 11.- ASPECTOS GENERALES DE LA AUTOMATIZACIÓN EN EL LABORATORIO ANALÍTICO     | <p>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.</p>   |
| Tema 12.- MÉTODOS DE ANÁLISIS AUTOMÁTICOS Y AUTOMATIZADOS                         | <p>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.</p>  |
| Tema 13.- SISTEMAS DE GESTIÓN DE INFORMACIÓN EN EL LABORATORIO                    | <p>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.</p>  |

### Planning

| Methodologies / tests           | Competencies | Ordinary class hours | 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.<br>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 | 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.