



Guía Docente						
Datos Identificativos				2021/22		
Asignatura (*)	Química Analítica Avanzada e Quimiometría		Código	610G01015		
Titulación	Grao en Química					
Descriptores						
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos		
Grao	1º cuatrimestre	Cuarto	Obrigatoria	6		
Idioma	CastelánInglés					
Modalidade docente	Presencial					
Prerrequisitos						
Departamento	Química					
Coordinación	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	http://campusvirtual.udc.es					
Descripción 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.					



Plan de continxencia	<p>1. Modificacións nos contidos Non se farán cambios</p> <p>2. Metodoloxías *Metodoloxías docentes que se manteñen Lecturas Seminarios Proba mixta Atención personalizada *Metodoloxías docentes que se modifican Prácticas de laboratorio que ao non poder realizarse presencialmente na Facultade sustituiranse pola resolución dun caso práctico plantexado polo profesor a grupos de alumnos; coa entrega dun informe individual por alumno e outro informe grupal.</p> <p>3. Mecanismos de atención personalizada ao alumnado - Correo electrónico: Diariamente. para facer consultas, solicitar encontros virtuales para resolver dúbidas e facer seguimento do caso práctico. ? Moodle: Diariamente. Segundo a necesidade dos alumnos. Dispón de ?foros temáticos? para formular as consultas necesarias. ? Teams: 1 sesión semanal do grupo grande para o avance dos contidos teóricos e dos seminarios, na franxa horaria asignada á materia. De 1 a 2 sesions semanais (segundo necesidades dos alumnos) en grupo pequeno (< 6 persoas), para o seguimento e apoio na realización do informe e presentación das lecturas, problemas plantexados nos seminarios e do plantexamento e resolución do caso práctico.</p> <p>4. Modificacións na avaliación *Observacións de avaliación: - Resolución do caso práctico (que substituyen ás prácticas de laboratorio) coa mesma porcentaxe de calificación. Valorarase a adecuación metodolóxica, o plantexamento, detalle e claridade nos informes; asimade, a discusión crítica final do mesmo en función do problema a resolver. - Mantense o resto de metodoloxías da guía docente, salvo que a proba mixta faríase virtual ou telemáticamente (vía Moodle e/ou Teams), tanto na primeira como na segunda oportunidade. A situación é igual para o alumnado con adicación completa como para o alumnado con recoñecimento de adicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia, segundo establece a "NORMA QUE REGULA O RÉXIME DE DEDICACIÓN AL ESTUDIO DE LOS ESTUDIANTES DE GRADO EN LA UDC (Arts. 2.3; 3.b e 4.5) (29/5/212).</p> <p>5. Modificacións da bibliografía ou webgrafía Non se realizarán cambios. Xa disponen de todos os materiais de traballo en formato dixital no Moodle.</p> <p>6. No caso de existiren problemas de aforo nos espazos designados para a realización de actividades presenciais, reservaranse espazos adicionais nos que os alumnos poidan seguir as actividades a través da plataforma TEAMS. No caso das actividades prácticas, os grupos desdobraranse para adaptarse á capacidade do laboratorio.</p>
----------------------	--

Competencias do título

Código	Competencias 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 solucionalos.
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 enfrentarse.
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 do título	
Saber discernir e elexir 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 C3 B4
Saber diferenciar os obxectivos e aplicabilidade das principais ferramentas quimiométricas. Saber extraer información quimiométrica multivariable dun exemplo sinxelo relacionado cun estudo medioambiental.		A14 A15 A16 A20 A26	B2 C2 B4 C3 B5 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 tratamiento 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 muestras sólidas. Métodos de extracción de muestras líquidas. Purificación, fraccionamento e concentración de extractos orgánicos. Aplicacións analíticas.
Tema 4. Automatización no laboratorio analítico	Obxectivos da automatización. Ventaxas e desventaxas 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 producción. 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. Análise multivariable de datos	Introducción. Clasificación de métodos de recoñecimento 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 estudiante aplicará os conceptos teóricos desenvolvidos ao longo do curso aplicando as metodoloxías analíticas necesarias para resolver un problema real no campo medioambiental, industrial, agroalimentario, clínico...

Planificación

Metodoloxías / probas	Competencias	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Prácticas de laboratorio	A15 A16 A17 A19 A20 A21 A22 A23 A26 B3 B4 B5	20	32	52
Seminario	A15 A16 A20 A21 B2 B3 B4 C3	6	7.8	13.8
Lecturas	C4 C6 C8	1	5	6
Sesión maxistral	A15 A16 A21 A22 C4	21	52.5	73.5
Proba mixta	A14 A15 C2	3	0	3
Atención personalizada		1.5	0	1.5

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

Metodoloxías

Metodoloxías	Descripción
Prácticas de laboratorio	Abordaranse diferentes técnicas de pretratamiento da mostra e de separación do analito necesarias antes das determinacións instrumentais (ex. cromatografía). Como trabalho inherente ao desenvolvemento experimental empregaránse diferentes ferramentas químiométricas tanto no proceso de calibración, deseño de experimentos e evaluación de parámetros de calidad analíticos. Ao finalizar as prácticas o estudiante entregará unha memoria do traballo realizado cun análise crítico e detallado.
Seminario	Remárquense aspectos esenciais dos temas tratados, resolución de boletíns de exercicios numéricos e unha lectura que o profesor entregará previamente aos estudiantes. Realizarase unha aplicación de técnicas multivariantes de recoñecemento de pautas adecuadas para a interpretación dos datos medioambientais.
Lecturas	Formaranse grupos de alumnos aos que se lles asignará una lectura seleccionada polo profesor relacionada co análise de trazas. Posteriormente o grupo deberá entregar un pequeno informe no que identifique e resuma a estratexia seguida para a resolución do problema analítico na lectura así como a presentación en power point do mesmo.
Sesión maxistral	Acerca dos contidos más importante do programa. Para un total aproveitamento das mismas, recoméndase que o estudiante lea previamente os aspectos fundamentais do tema a tratar nos textos recomendados. Para a impartición das mesmas empregaránse medios audiovisuais e/o informáticos e fomentarase o diálogo para a correcta comprensión dos contenidos, a resolución de dudas 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 estudiante. Constará tanto de preguntas teóricas como cuestiós aplicadas, resolución de problemas e contidos prácticos. A data de realización indicarase no calendario de exames do grado.



Atención personalizada

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

Avaliación

Metodoloxías	Competencias	Descripción	Cualificación
Lecturas	C4 C6 C8	Valorarase o informe detallado das mesmas, no que o estudiante debe identificar e xustificar as estratexias seguidas nas mesmas para a resolución dos problemas analíticos.	15
Seminario	A15 A16 A20 A21 B2 B3 B4 C3	Valorarase a participación dos estudiantes neles, ademáis da resolución das cuestións, casos e/ou problemas plantexados polo profesor.	15
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.	25
Proba mixta	A14 A15 C2	Realizarase un exame que consistirá en cuestións tipo test de resposta única, cuestións de resposta breve e problemas numéricos relacionados cos contenidos teóricos. Na proba obxectiva incluiranse algunas preguntas relacionadas coas prácticas de laboratorio.	45

Observacións avaliación



O

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

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

A

proba mixta consistirá en dúas partes: cuestións teóricas e exercicios numéricos, cada unha delas deberá ser superada. No caso de superar algunha das partes na primeira oportunidade, ésta NON se conservará na segunda oportunidade.

PRIMEIRA

OPORTUNIDADE: Para superar a materia é preciso obter tanto na proba mixta coma nas prácticas de laboratorio unha nota mínima de 5 (sobre 10). A cualificación final da materia non será inferior á nota da proba mixta nin á cualificación resultante de ponderar co resto de actividades avaliables.

O

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

SEGUNDA

OPORTUNIDADE: Na segunda oportunidade realizarase a proba mixta cuxa cualificación substituirá á obtida na primeira oportunidade manténdose as calificacións das prácticas, seminarios e lecturas obtidas na primeira oportunidade. A cualificación final da materia non será inferior á nota da proba mixta nin á calificación resultante de ponderar o resto de actividades avaliables. Os

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

CONVOCATORIA ADIANTADA: Manteranse as cualificacións das actividades evaluables do curso anterior pero a calificación final obterase tendo en conta as porcentaxes do curso actual.

ESTUDANTES CON RECOÑECIMENTO DE ADICACIÓN

A TEMPO PARCIAL: Aplicanese os mesmos criterios de avaliação indicados anteriormente.

ESTUDANTES CON DISPENSA ACADÉMICA DE EXENCIÓN DE ASISTENCIA (de acordo coa normativa da UDC): O alumno con dispensa académica de exención de asistencia será avaliado segundo os mesmos criterios de avaliação indicados anteriormente (salvo na parte de Seminarios onde se terá en conta soamente a resolución de cuestións/problemas expostos polo profesor). 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. Na avaliação da materia aplicarase todo o establecido no artigo 14, relativo á Comisión de Fraude e responsabilidades disciplinarias, das Normas de avaliação de graos e másteres da UDC.

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- CaMARA, C.; PEREZ-CONDE, C (2011). Análisis químico de trazas. 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- MONGAY FERNÁNDEZ, CARLOS (2005). Quimiometría. Universidad de Valencia- SOGORB SANCHEZ,M.A; VILANOVA GISBERT,E. (2004). Técnicas análicas de contaminantes químicos. Díaz de Santos, Madrid
---------------------	--



Bibliografía complementaria	<ul style="list-style-type: none">- JOHN R. DEAN (2014). Environmental Trace Analysis : techniques and applications. United Kingdom, Wiley & Sons- KELLNER, R.; MERMET, J.M.; OTTO, M.; WIDMER, H.M. (2004). Analytical chemistry: a modern approach to analytical science. Winheim, Willey-VCH- VALCARCEL, M.; CARDENAS, M.S. (2000). Automatización y miniaturización en química analítica. Barcelona, Springer-Verlag- OTTO, M. (2007). Chemometrics : statistics and computer application in analytical chemistry . 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, fazer unha boa preparación das prácticas e utilizaras 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 eletroanalíticas, óptica e cromatográfica). Ter coñecemento de ferramentas de informática (follas de cálculo, procesamento de texto, navegación en "internet"). Coñecementos básicos de inglés. Programa Green Campus Facultade de Ciencias: Para axudar a conseguir unha contorna inmediata sustentable e cumplir co punto 6 da "Declaración Ambiental da Facultade de Ciencias (2020)", os traballos documentais que se realicen nesta materia: a) Solicitaranse maioritariamente en formato virtual e soporte informático b) De realizarse en papel: non se empregarán plásticos, realizaranse impresións a dobre cara, empregarase papel reciclado, cando sexa posible, evitárase a impresión de borradores.

(*)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