



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|---|--------------------|---------------------------------|-----------|
| Datos Identificativos | | | | 2023/24 |
| 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 | | | |
| Coordinación | 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 | |
| | Novo Quiza, Natalia | | natalia.novo@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 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 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 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 estudante 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 / 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 | 25.5 | 45.5 |
| Seminario | A15 A16 A20 A21 B2 B3 B4 C3 | 6 | 9.5 | 15.5 |
| Lecturas | C4 C6 C8 | 1 | 10 | 11 |
| 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 | 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 os estudantes 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 unha lectura que o profesorado entregará previamente aos estudantes. Realizarase unha aplicación de técnicas multivariantes de recoñecemento de pautas adecuadas para a interpretación dos datos medioambientais. |
| Lecturas | Formaranse grupos de alumnos/as aos que se lles asignará una lectura seleccionada polo profesorado 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 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 | As clases de prácticas de laboratorio están concebidas coma actividades en grupos reducidos nas que o alumnado participa directamente. Deste xeito realízase unha atención personalizada permitindo un mellor seguimento e orientación. No caso das lecturas, programárase unha titoría para cada grupo de estudantes co gallo de discutir as actividades propostas e resolver dúbidas das mesmas. Deste xeito poderase tamén analizar se o proceso de aprendizaxe do alumnado é axeitado. O alumnado 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 estudantado 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 estudantes neles, ademáis da resolución das cuestións, casos e/ou problemas plantexados polo profesorado. | 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 incluíranse algunhas preguntas relacionadas coas prácticas de laboratorio. | 45 |

Observacións avaliación



A realización fraudulenta das probas ou actividades de avaliación, ou a detección de plaxio nalgunha delas, implicará que o/a estudante será cualificado con ?suspense? (nota numérica 0) na convocatoria correspondente do curso académico, tanto se a comisión da falta se produce na primeira oportunidade como na segunda. Para isto, procederase a modificar a súa cualificación na acta de primeira oportunidade, se fose necesario

O traballo do alumno será avaliado de forma continua a través da asistencia ás actividades avaliáveis, 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 obrigatoria 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 avaliáveis.

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 cualificacións das prácticas, seminarios e lecturas obtidas na primeira oportunidade. A cualificación final da materia non será inferior á nota da proba mixta nin á cualificación resultante de ponderar o resto de actividades avaliáveis. 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 cualificación final obterase tendo en conta as porcentaxes do curso actual.

ESTUDANTES CON RECOÑECIMENTO DE ADICACIÓN

A TEMPO PARCIAL: Aplícanse os mesmos criterios de avaliación 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 avaliación 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. O alumnado con recoñecemento de adicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia será atendido en réxime de horas de titorías (previa cita). Na avaliación da materia aplicarase todo o establecido no artigo 14, relativo á Comisión de Fraude e responsabilidades disciplinarias, das Normas de avaliación de graos e másteres da UDC.



| | |
|------------------------------------|--|
| 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 analíticas 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, 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 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 cumprir co punto 6 da "Declaración Ambiental da Facultade de Ciencias (2020)", os traballos documentais que se realicen nesta materia: a) Solicítaranse maioritariamente en formato virtual e soporte informático b) De realizarse en papel: non se empregarán plásticos, realizaranse impresións a dobre cara, empregárase 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