



Guía docente				
Datos Identificativos				2023/24
Asignatura (*)	Química Analítica Avanzada y Quimiometría		Código	610G01015
Titulación	Grao en Química			
Descriptorios				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Grado	1º cuatrimestre	Cuarto	Obligatoria	6
Idioma	CastellanoInglés			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinador/a	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			
Descripción general	Asignatura que trata sobre la problemática del análisis de trazas y las metodologías de trabajo aplicables. Planificación y ejecución de las distintas etapas del proceso analítico para llevar a cabo el análisis de trazas. Ventajas de la automatización en este tipo de análisis. En esta materia se inicia al alumno en el conocimiento de los fundamentos de las principales herramientas quimiométricas aplicables tanto a calibración, diseño y optimización de experimentos y análisis multivariante de datos, necesarias en el mundo actual para resolver problemas analíticos concretos.			

Competencias / Resultados del título	
Código	Competencias / Resultados del título
A14	Demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
A15	Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos.
A16	Adquirir, evaluar y utilizar los datos e información bibliográfica y técnica relacionada con la Química.
A17	Trabajar en el laboratorio Químico con seguridad (manejo de materiales y eliminación de residuos).
A19	Llevar a cabo procedimientos estándares y manejar la instrumentación científica.
A20	Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio.
A21	Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.
A22	Planificar, diseñar y desarrollar proyectos y experimentos.
A23	Desarrollar una actitud crítica de perfeccionamiento en la labor experimental.
A26	Llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorios implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
B2	Resolver un problema de forma efectiva.
B3	Aplicar un pensamiento crítico, lógico y creativo.
B4	Trabajar de forma autónoma con iniciativa.
B5	Trabajar de forma colaborativa.
C2	Dominar la expresión y la comprensión de forma oral y escrita de un idioma extranjero.
C3	Utilizar las herramientas básicas de las tecnologías de la información y las comunicaciones (TIC) necesarias para el ejercicio de su profesión y para el aprendizaje a lo largo de su vida.
C4	Desarrollarse para el ejercicio de una ciudadanía abierta, culta, crítica, comprometida, democrática y solidaria, capaz de analizar la realidad, diagnosticar problemas, formular e implantar soluciones basadas en el conocimiento y orientadas al bien común.
C6	Valorar críticamente el conocimiento, la tecnología y la información disponible para resolver los problemas con los que deben enfrentarse.
C8	Valorar la importancia que tiene la investigación, la innovación y el desarrollo tecnológico en el avance socioeconómico y cultural de la sociedad.

Resultados de aprendizaje



Resultados de aprendizaje	Competencias / Resultados del título		
Saber discernir y elegir las metodologías de trabajo aplicables a cada problema	A15 A16 A20 A22 A26	B3	C4 C6 C8
Saber planificar y ejecutar las distintas etapas del proceso analítico para el análisis de trazas, incluyendo la interpretación de los datos obtenidos.	A14 A17 A19 A20 A21 A23	B2 B4	C3
Saber diferenciar los objetivos y aplicabilidad de las principales herramientas quimiométricas. Saber extraer información quimiométrica multivariable de un ejemplo sencillo relacionado con un estudio medioambiental.	A14 A15 A16 A20 A26	B2 B4 B5	C2 C3 C4 C6

Contenidos	
Tema	Subtema
Tema 1. Introducción al análisis de trazas	Importancia del análisis de trazas y campos de aplicación. El proceso analítico en el análisis de trazas: requerimientos especiales. Importancia y requisitos básicos del muestreo. Estrategias de muestreo. Conservación y tratamiento de la muestra: fuentes de error. Aseguramiento de la calidad en el análisis de trazas.
Tema 2. Análisis de trazas inorgánicas	Introducción. Destrucción de matrices orgánicas. Descomposición y disolución de matrices inorgánicas. Procesos de separación y preconcentración en análisis de trazas inorgánicas. Especiación de elementos traza. Aplicaciones analíticas.
Tema 3. Análisis de trazas orgánicas	Introducción. Métodos de extracción de muestras sólidas. Métodos de extracción de muestras líquidas. Purificación, fraccionamiento y concentración de extractos orgánicos. Aplicaciones analíticas.
Tema 4. Automatización en el laboratorio analítico	Objetivos de la automatización. Ventajas y desventajas de la automatización. Clasificación de los sistemas analíticos automáticos. Robotización del laboratorio. Miniaturización. Análisis de procesos.
Tema 5. Introducción a la quimiometría	Definición de quimiometría. La quimiometría en el proceso analítico. Concepto de incertidumbre y cálculos básicos.
Tema 6. Inferencia estadística y calibración univariable	Test estadísticos de inferencia en los laboratorios analíticos: ensayos de hipótesis y análisis de varianza. Aplicaciones al laboratorio y al control de producción. Métodos de calibración. Calibración univariante por regresión lineal de mínimos cuadrados. Validación del modelo de calibración. Intervalos de confianza.
Tema 7. Diseño y optimización de experimentos	Diseño experimental: principios básicos. Tipos de diseños: diseños factoriales, diseños factoriales fraccionados y diseños Plackett-Burman. Optimización secuencial: método simplex. Diseños de superficie de respuesta.
Tema 8. Análisis multivariable de datos	Introducción. Clasificación de métodos de reconocimiento de pautas. Métodos no supervisados: análisis de agrupaciones, análisis de componentes principales. Métodos supervisados: método SIMCA, método del vecino más próximo (KNN).
Prácticas de laboratorio	El alumno aplicará los conceptos teóricos desarrollados a lo largo del curso aplicando las metodologías analíticas necesarias para resolver un problema real en el campo medioambiental, industrial, agroalimentario, clínico..



Planificación

Metodologías / pruebas	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciales y virtuales)	Horas trabajo autónomo	Horas totales
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 magistral	A15 A16 A21 A22 C4	21	52.5	73.5
Prueba mixta	A14 A15 C2	3	0	3
Atención personalizada		1.5	0	1.5

(*Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos

Metodologías

Metodologías	Descripción
Prácticas de laboratorio	Se abordarán diferentes técnicas de pretratamiento de muestra y de separación del analito necesarias antes de las determinaciones instrumentales (ej. cromatografía). Como trabajo inherente al desarrollo experimental se emplearán diferentes herramientas quimiométricas tanto en el proceso de calibración, diseño de experimentos y evaluación de parámetros de calidad analíticos. Al finalizar las prácticas el alumnado entregará una memoria del trabajo realizado con un análisis crítico e detallado.
Seminario	Se remarcarán los aspectos esenciales de los temas tratados, resolución de boletines de ejercicios numéricos y cuestiones que el profesorado entregará previamente a los estudiantes. Se realizarán ejercicios de intercomparación de los resultados obtenidos por diferentes procedimientos, esta revisión ayuda a entender la complejidad y dificultad de un análisis de trazas. Se realizará una aplicación de técnicas multivariantes de reconocimiento de pautas adecuadas para la interpretación de los datos medioambientales.
Lecturas	Se formarán grupos de alumnos/as a los que se les asignará una lectura seleccionada por el profesorado relacionada con el análisis de trazas. Posteriormente el grupo deberá entregar un pequeño informe en el que identifique y resuma la estrategia sucesiva para la resolución del problema analítico en la lectura así como la presentación en power point del mismo.
Sesión magistral	Sobre los contenidos más importantes del programa. Para un total aprovechamiento de las mismas, se recomienda que el estudiante lea previamente los aspectos fundamentales del tema a tratar en los textos recomendados. Para la impartición de las mismas se emplearán medios audiovisuales y/o informáticos y se fomentará el diálogo para la correcta comprensión de los contenidos, la resolución de dudas y fomento del sentido crítico.
Prueba mixta	Prueba escrita que se realiza en la convocatoria oficial de enero/julio en la que se evalúa el grado de aprendizaje y de adquisición de competencias por parte del estudiante. Constará tanto de preguntas teóricas como cuestiones aplicadas, resolución de problemas y contenidos prácticos. La fecha de realización se indicará en el calendario de exámenes del grado.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
--------------	-------------



Lecturas Seminario Prácticas de laboratorio	<p>Las clases de prácticas de laboratorio están concebidas como actividades en grupos reducidos en las que el alumnado participa directamente. De este modo se realiza una atención personalizada permitiendo un mejor seguimiento y orientación.</p> <p>En el caso de las lecturas, se programará una tutoría para cada grupo de estudiantes con el fin de discutir las actividades propuestas y resolver dudas de las mismas. De esta manera también se podrá analizar si el proceso de aprendizaje del alumnado es adecuado.</p> <p>El alumnado con reconocimiento de dedicación a tiempo parcial y dispensa académica de exención de asistencia será atendido en régimen de horas de tutorías (previa cita).</p>
---	--

Evaluación			
Metodologías	Competencias / Resultados	Descripción	Calificación
Lecturas	C4 C6 C8	Se valorará el informe detallado de las mismas en las que el alumnado sepa identificar y justificar las estrategias seguidas en las mismas para la resolución de problemas analíticos.	15
Seminario	A15 A16 A20 A21 B2 B3 B4 C3	Se valorará la participación del alumnado, así como la resolución de las cuestiones, casos y/o problemas planteados por el profesorado.	15
Prácticas de laboratorio	A15 A16 A17 A19 A20 A21 A22 A23 A26 B3 B4 B5	Se valorarán tanto por el trabajo experimental (destreza, actitud, orden, atención, interpretación de los resultados obtenidos) como por la elaboración del diario de laboratorio.	25
Prueba mixta	A14 A15 C2	Se realizará un examen que consistirá en cuestiones tipo test de respuesta única, cuestiones de respuesta breve y problemas numéricos relacionados con los contenidos teóricos. En la prueba mixta se incluirán algunas preguntas relacionadas con las prácticas de laboratorio.	45

Observaciones evaluación



La realización fraudulenta de las pruebas o actividades de evaluación, incluyendo el plagio en alguna de ellas, una vez comprobada, implicará directamente la cualificación de suspenso (nota numérica "0") en la materia en la convocatoria correspondiente del curso académico, tanto si la falta se comete en la primera oportunidad como en la segunda. Para eso se procederá a modificar su calificación en el acta de la primera convocatoria, si fuese necesario.

El trabajo del alumno será evaluado de forma continua a través de la asistencia a las actividades evaluables, su participación en los seminarios, la resolución de las cuestiones y problemas numéricos, informe de las lecturas, prácticas de laboratorio y por la prueba mixta.

La realización de las prácticas es obligatoria y la no realización de las mismas impide la superación de la materia.

La prueba mixta consistirá en dos partes: cuestiones teóricas y ejercicios numéricos, cada una de ellas deberá ser superada. En el caso de superar alguna de las partes en la primera oportunidad, ésta NON se conservará en la segunda oportunidad.

PRIMERA OPORTUNIDAD: Para superar la materia es preciso obtener tanto en la prueba mixta como en las prácticas de laboratorio una nota mínima de 5 (sobre 10). La calificación final de la materia non será inferior a la nota de la prueba mixta ni a la calificación resultante de ponderar con el resto de actividades evaluables.

El alumno obtendrá la calificación de No Presentado cuando no realice ni las prácticas de laboratorio ni la prueba mixta.

SEGUNDA OPORTUNIDAD: En la segunda oportunidad se realizará la prueba mixta cuya calificación sustituirá a la obtenida en la primera oportunidad manteniéndose las calificaciones de las prácticas, seminarios y lecturas obtenidas en la primera oportunidad. La calificación final de la materia no será inferior a la nota de la prueba mixta ni a la calificación resultante de ponderar el resto de actividades evaluables. Los alumnos evaluados en la segunda oportunidad solo podrán optar a la matrícula de honor si el número máximo de éstas para el correspondiente curso no se cubrieron en su totalidad en la primera oportunidad.

CONVOCATORIA ADELANTADA: Se realizará la prueba mixta cuya cualificación sustituirá a la obtenida en el curso pasado manteniéndose las calificaciones del resto de actividades evaluables. La calificación final se obtendrá teniendo en cuenta los porcentajes del curso actual.

ESTUDIANTES CON RECONOCIMIENTO DE DEDICACIÓN A TIEMPO PARCIAL: Se aplican los mismos criterios de evaluación indicados anteriormente.

LOS ESTUDIANTES CON DISPENSA ACADÉMICA DE EXENCIÓN DE ASISTENCIA (de acuerdo con la normativa de la UDC): Se aplican los mismos criterios de evaluación indicados anteriormente (salvo en la parte de Seminarios donde se tendrá en cuenta solamente la resolución de las cuestiones/problemas planteados por el profesor). La realización de las prácticas se facilitará dentro de la flexibilidad que permitan los horarios de coordinación y los recursos materiales y humanos. Esto aplica a ambas oportunidades. El alumnado con reconocimiento de dedicación a tiempo parcial y dispensa académica de exención de asistencia será atendido en régimen de horas de tutorías (previa cita). En la evaluación de la materia se aplicará todo el establecido en el artículo 14, relativo a la Comisión de Fraude y responsabilidades disciplinarias, de las Normas de evaluación de grados y másteres de la UDC.

Fuentes de información

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
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. Weinheim, Wiley-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 . Weinheim, Wiley-VCH

Recomendaciones



Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Química Analítica 1/610G01011
Química Analítica 2/610G01012
Química Analítica Instrumental 1/610G01013
Química Analítica Instrumental 2/610G01014

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Medio ambiente y calidad/610G01037

Asignaturas que continúan el temario

Trabajo de fin de Grado/610G01043

Otros comentarios

Se recomienda llevar al día la asignatura, realizar la preparación de las prácticas de forma exhaustiva y aprovecharlas para aclarar dudas, conceptos, completando la formación teórica necesaria. Intentar fomentar la capacidad de trabajar con "criterio analítico" desde la primera a la última etapa del procedimiento analítico. Tener conocimientos de los métodos clásicos e instrumentales de análisis (volumetrías, gravimetrías, métodos de separación, técnicas electroanalíticas, ópticas y cromatográficas). Tener conocimientos de las herramientas informáticas (hojas de cálculo, procesador de textos, navegación "internet"). Conocimientos básicos de inglés. Programa Green Campus Facultad de Ciencias: Para ayudar a conseguir un entorno inmediato sostenible y cumplir con el punto 6 de la "Declaración Ambiental de la Facultad de Ciencias (2020)", los trabajos documentales que se realicen en esta materia: a) Se solicitarán mayoritariamente en formato virtual y soporte informático; b) De realizarse en papel: no se emplearán plásticos, se realizarán impresiones a doble cara, se empleará papel reciclado, cuando sea posible, se evitará la impresión de borradores.

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías