



Guía Docente				
Datos Identificativos			2017/18	
Asignatura (*)	Química Analítica Avanzada e Quimiometría		Código	610G01015
Titulación				
Descriptor				
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	
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 do título	
Código	Competencias do título

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe	Competencias do título		
Saber discernir e elixir 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. Introdución 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. Destrución 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. Introdución 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 cadrados. 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 estudante aplicará os conceptos teóricos desenvolvidos ao longo do curso. Preséntanse diferentes problemas reais (campo medioambiental, industrial, agroalimentario, clínico..) que os estudantes terán que resolver.

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	30	50
Seminario	A15 A16 A20 A21 B2 B3 B4 C3	6	12	18
Lecturas	C4 C6 C8	1	2.5	3.5
Sesión maxistral	A15 A16 A21 A22 C4	21	52.5	73.5
Proba mixta	A14 A15 C2	3	0	3
Atención personalizada		2	0	2
*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 o estudante 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 cuestións que o profesor entregará previamente aos estudantes. Realizaránse exercicios de intercomparación dos resultados obtidos por diferentes procedementos, esta revisión axuda a entender a complexidade e dificultade dun análise de trazas. Realizarase unha aplicación de técnicas multivariantes de recoñecemento de pautas adecuadas para a interpretación dos datos medioambientais.
Lecturas	Realizaranse lectura/s seleccionada/s polo profesor relacionadas co análise de trazas. Posteriormente o estudante deberá entregar un pequeno informe no que identifique e resuma a estratexia seguida para a resolución do problema analítico.
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	A atención personalizada que se describe en relación con estas metodoloxías ideouse como momentos de traballo presencial co estudante, polo que implica unha participación obrigatoria do mesmo baixo a supervisión do profesor, o cal resolverá dúbidas, organizará procura bibliográfica, etc. O alumno 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	Descrición	Cualificación
Lecturas	C4 C6 C8	Valorarase o informe detallado das mesmas, no que o estudante debe identificar e xustificar as estratexias seguidas nas mesmas para a resolución dos problemas analíticos.	5
Seminario	A15 A16 A20 A21 B2 B3 B4 C3	Valorarase a participación dos estudantes neles, ademais da resolución das cuestións, casos e/ou problemas plantexados polo profesor.	10
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.	15
Proba mixta	A14 A15 C2	Realizarase un exame que consistirá en preguntas tipo test de resposta única, preguntas de resposta breve e problemas numéricos relacionados cos contidos teóricos. Na proba obxectiva incluíranse algunhas preguntas relacionadas coas prácticas de laboratorio.	70

Observacións avaliación



O

traballo do alumno será avaliado de forma continua a través da asistencia ás actividades avaliáveis, a súa participación nos traballos de seminario, 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 das cales 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 na proba mixta unha nota mínima de 5 (sobre 10) e no resto de actividades avaliáveis unha nota mínima de 4 (sobre 10) e alcanzar, ponderadas e sumadas as cualificacións de todas as actividades avaliáveis unha nota mínima de 5 (sobre 10). A materia non será aprobada (mesmo no caso de que a suma total supere 5) se a puntuación dunha das actividades avaliáveis non alcanza o 4 e neste caso, a puntuación final da materia será suspenso (4,5).

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 realizarse a proba mixta cuxa calificación substituirá á obtida na primeira oportunidade manténdose as cualificacións das prácticas, seminarios e lecturas obtidas na primeira oportunidade. Para superar a materia nesta convocatoria é preciso obter na proba mixta unha nota mínima de 5 (sobre 10) e alcanzar, ponderadas e sumadas as cualificacións de todas as actividades avaliáveis unha nota mínima de 5 (sobre 10).

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.

DEDICACIÓN

A TEMPO PARCIAL E DISPENSA ACADÉMICA

O alumno con recoñecemento de dedicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia será avaliado unicamente mediante as cualificacións obtidas na proba mixta (80%), lecturas (5%) e nas prácticas (15%). 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.

SUCESIVOS CURSOS ACADÉMICOS

Polo que se refire aos sucesivos cursos académicos, o proceso de ensino-aprendizaxe, *incluída a avaliación, refírese a un curso académico e, por tanto, volvería comezar cun novo curso, *incluídas todas as actividades e procedementos de avaliación que sexan programadas para o devandito curso.



Fontes de información

Bibliografía básica	- 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). Quimiometría. Madrid, Sintesis
Bibliografía complementaria	- 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

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 electroanalíticas, óptica e cromatográfica). Ter coñecemento de ferramentas de informática (follas de cálculo, procesamento de texto, navegación en "internet"). Coñecementos básicos de inglés.

(*)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 de acordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías