Guía Docente				
Datos Identificativos				2015/16
Asignatura (*)	Química Analítica Avanzada e Quimiometría		Código	610G01015
Titulación	Grao en Química			
Descriptores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuadrimestre	Cuarto	Obrigatoria	6
Idioma	CastelánInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Analítica			
Coordinación	Lopez Mahia, Purificacion	Correo electrónico	purificacion.lopez.mahia@udc.es	
Profesorado	Andrade Garda, Jose Manuel Lopez Mahia, Purificacion Muniategui Lorenzo, Soledad Rodríguez González, Noelia Salgueiro González, Noelia	Correo electrónico	jose.manuel.andrade@udc.es purificacion.lopez.mahia@udc.es soledad.muniategui@udc.es noelia.rodriguez.gonzalez@udc.es n.salgueiro@udc.es	
Web	http://campusvirtual.udc.es			
Descrición xeral	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, tan necesarias en el mundo actual para resolver problemas analíticos concretos. 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. This subject deals with quantifying substances in different types of samples at trace levels. The most common methodologies will be presented, along with their usual problems, difficulties and limitations when applying them. Major emphasis will be placed on how to plan and execute the different stages of the so-called ?analytical process?. Options to automate several working steps will be discussed. Finally, some basic tools to treat the final data sets will be studied. This is termed chemometrics and it deals with experimental design and optimization of an analytical procedure, calibration and multivariate analyses of the data (including data mining).			

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 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 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 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 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	A23 A22 A21 A20 A19 A17 A16 A15 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 evaluación 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 análisis 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 mismas, 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 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 estudante. Constará tanto de preguntas teóricas como cuestións aplicadas, resolución de problemas e contidos prácticos. A data de realización indicarase no calendario de exames do grado.

Atención personalizada	
Metodoloxías	**Descrición**
Lecturas Seminario Prácticas de laboratorio	A atención personalizada que se describe en relación a estas metodoloxías concíbense como momentos de traballo pesencial co alumno, polo que implican unha participación obrigatoria deste, baixo a supervisión do profesor, o cal resolverá dúbidas, organizará busca bibliográfica, etc. Terán unha sesión de aproximadamente media hora de duración de atención personalizada ligada ás tres metodoloxías descritas. Esta atención realizarase no despacho do profesor.

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, además da resolución das cuestións, casos e/ou problemas plantexados polo profesor. Para algún en concreto realizarase unha breve exposición oral polo estudante.	10
Prácticas de laboratorio	A23 A22 A21 A20 A19 A17 A16 A15 A26 B3 B4 B5	Valorarase de xeito continuo, tanto polo traballo experimental (destreza, actitude, orde, atención) como pola memoria entregada. Na proba obxectiva incluiranse algunhas preguntas relacionadas coas prácticas 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 contenidos teóricos e prácticos.	70

Observacións avaliación

O traballo do estudante será evaluado de forma continua e periódica a través de asistencia regular ás actividades evaluables, a súa participación nos traballos de seminario, pola resolución de cuestións e problemas plantexados polo profesor (que terán que entregar resoltos no plazo que se indique), polas prácticas de laboratorio (cuxa realización é obrigatoria) e polos exámenes escritos realizados. Ao finalizar as prácticas deberán entregar un informe do procedimento, resultados obtidos e interpretación deles. Para superar a asignatura é preciso obter, tanto na proba objextiva como no resto de actividades evaluables, unha nota mínima de 4 (sobre 10) e acadar, sumadas as cualificación de tódalas actividades evaluables unha nota mínima de 5 (sobre 10). A asignatura non será aprobada (incluso no caso de que a suma total supere 5) se a puntuación dunha das actividades evaluables non acada o 4. Neste caso, a puntuación final da asignatura será suspenso (4). O estudante terá a calificación de Non Presentado cando teña feito menos do 25% das actividades académicas programadas, e non se presente ao exame final. Na contorna de "evaluación continuada" a "segunda oportunidade de xullo" enténdese como unha segunda oportunidade de realización da proba mixta. Xa que logo, para as prácticas, seminarios, lecturas e traballos tutelados, manteranse as cualificacións obtidas ao longo do curso, mentres que a cualificación da proba obxectiva da segunda oportunidade substituirá á obtida na primeira oportunidade. Os alunos evaluados na segunda oportunidade só poderán optar a matrícula de honra se o número máximo déstas para o correspondiente curso non se ten cuberto na súa totalidade na primeira oportunidade. No que atingue aos sucesivos cursos académicos, o proceso de ensino-aprendizaxe, incluída a avaliación, refírese a un curso académico e, xa que logo, voltaría a comezar cun novo curso, incluídas tódalas actividades e procedimentos 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 - 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 - CaMARA, C.; PEREZ-CONDE, C (2011). Análisis químico de trazas. Madrid, Sintesis
Bibliografía complementaria	- VALCARCEL, M.; CARDENAS, M.S. (2000). Automatización y miniaturización en química analítica. Barcelona, Springer-Verlag - KELLNER, R,; MERMET, J.M.; OTTO, M.; WIDMER, H.M. (1998). Analytical chemistry: a modern approach to analytical science. Winheim, Willey-VCH - OTTO, M. (2007). Chemometrics. 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.

(*)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