



| Guía Docente          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |                    |                                 |           |
|-----------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------|---------------------------------|-----------|
| Datos Identificativos |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |                    | 2022/23                         |           |
| Asignatura (*)        | Química Analítica Avanzada e Quimiometría                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                    | Código                          | 610G01015 |
| Titulación            | Grao en Química                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |                    |                                 |           |
| 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 |           |
|                       | Munategui Lorenzo, Soledad                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                    | soledad.munategui@udc.es        |           |
|                       | Novo Quiza, Natalia                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |                    | natalia.novo@udc.es             |           |
|                       | Sánchez Piñero, Joel                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |                    | joel.sanchez@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                                                                                                                                                                                                                                 |
| 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 do título                 |                |                      |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------|----------------|----------------------|
| Saber discernir e eleixir as metodoloxías de traballo aplicables a cada problema.                                                                                                                           | A15<br>A16<br>A20<br>A22<br>A26        | B3             | C4<br>C6<br>C8       |
| Saber planificar e executar as distintas etapas do proceso analítico para o análise de trazas, xunto coa interpretación dos datos obtidos.                                                                  | A14<br>A17<br>A19<br>A20<br>A21<br>A23 | B2<br>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<br>A15<br>A16<br>A20<br>A26        | B2<br>B4<br>B5 | C2<br>C3<br>C4<br>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. 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. 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 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 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<br>A20 A21 A22 A23<br>A26 B3 B4 B5 | 20                | 25.5                                      | 45.5         |
| Seminario                                                                                                                | A15 A16 A20 A21 B2<br>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 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 unha lectura que o profesor 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 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 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<br>Seminario<br>Prácticas de laboratorio | <p>As clases de prácticas de laboratorio están concebidas coma actividades en grupos reducidos nas que o alumno participa directamente. Deste xeito realízase unha atención personalizada dos alumnos permitindo un mellor seguimento e orientación.</p> <p>No caso das lecturas, programárase unha tutoría 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 alumno é axeitado.</p> <p>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).</p> |



| 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.                                                                                          | 15            |
| Seminario                | A15 A16 A20 A21 B2<br>B3 B4 C3                     | Valorarase a participación dos estudantes neles, ademáis da resolución das cuestións, casos e/ou problemas plantexados polo profesor.                                                                                                                               | 15            |
| Prácticas de laboratorio | A15 A16 A17 A19<br>A20 A21 A22 A23<br>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 inclúiranse algunhas preguntas relacionadas coas prácticas de laboratorio. | 45            |

## Observacións avaliación



O

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

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 avaliadas. 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. 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.

A realización fraudulenta das probas ou actividades de avaliación, unha vez comprobada, implicará directamente a cualificación de suspenso "0" na materia na convocatoria correspondente, invalidando así calquera cualificación obtida en todas as actividades de avaliación de cara a convocatoria extraordinaria.



|                                    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
|------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Bibliografía básica</b>         | <ul style="list-style-type: none"> <li>- CAMARA, C.; FERNANDEZ, P.; MARTIN-ESTEBAN, A.; PEREZ-CONDE, C.; VIDAL, M. (2002). Toma y tratamiento de muestra. Madrid, Sintesis</li> <li>- CaMARA, C.; PEREZ-CONDE, C (2011). Análisis químico de trazas. Madrid, Sintesis</li> <li>- MILLER, J.N.; MILLER, J.C. (2002). Estadística y quimiometría para química analítica, 4th edition. Madrid, Prentice-Hall</li> <li>- RAMIS, G.; GARCIA, M.C. (2001). Quimiometria. Madrid, Sintesis</li> <li>- MONGAY FERNÁNDEZ, CARLOS (2005). Quimiometría. Universidad de Valencia</li> <li>- SOGORB SANCHEZ, M.A; VILANOVA GISBERT, E. (2004). Técnicas analíticas de contaminantes químicos. Díaz de Santos, Madrid</li> </ul> |
| <b>Bibliografía complementaria</b> | <ul style="list-style-type: none"> <li>- JOHN R. DEAN (2014). Environmental Trace Analysis : techniques and applications. United Kingdom, Wiley &amp; Sons</li> <li>- KELLNER, R.; MERMET, J.M.; OTTO, M.; WIDMER, H.M. (2004). Analytical chemistry: a modern approach to analytical science. Weinheim, Wiley-VCH</li> <li>- VALCARCEL, M.; CARDENAS, M.S. (2000). Automatización y miniaturización en química analítica. Barcelona, Springer-Verlag</li> <li>- OTTO, M. (2007). Chemometrics : statistics and computer application in analytical chemistry . Weinheim, Wiley-VCH</li> </ul>                                                                                                                       |

## 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. 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) Solicitaranse maioritariamente en formato virtual e soporte informático b) De realizarse en papel: non se empregarán plásticos, realizaranse impresións a dobre cara, empregarse papel reciclado, cando sexa posible, evitarse 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 de acordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías