



Guía Docente				
Datos Identificativos			2023/24	
Asignatura (*)	Química Analítica Avanzada e Quimiometría		Código	610G01015
Titulación	Grao en Química			
Descriptorios				
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 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 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. 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 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 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 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 tutorías (previa cita).



Avaliación			
Metodoloxías	Competencias	Descrición	Cualificación
Lecturas	C4 C6 C8	Valorarase o informe detallado das mesmas, no que o estudiantado 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 inclúiranse 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 avaliábeis, 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 avaliábeis.

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 calificacións das prácticas, seminarios e lecturas obtidas na primeira oportunidade. A cualificación final da materia non será inferior á nota da proba mixta nin á calificación resultante de ponderar o resto de actividades avaliábeis. 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 calificación 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	- 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	- 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. 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