



FACULTADE DE QUÍMICA

**Máster Universitario en  
Investigación Química y  
Química Industrial  
Formación Obligatoria Avanzada**

PROFUNDIZACIÓN EN QUÍMICA ANALÍTICA

---

**Guía Docente**  
**(Curso 2014-2015)**

# Guía Docente.

## *1. Datos descriptivos de la materia.*

**Carácter:** Formación Obligatoria Avanzada

**Convocatoria:** 1<sup>er</sup> cuatrimestre

**Créditos:** 3 ECTS

### **Profesorado:**

#### **Universidad de Santiago de Compostela**

Antonia M<sup>a</sup> Carro Díaz

M<sup>a</sup> del Carmen Yebra Biurrun (coordinadora)

#### **Universidad de Universidad de Vigo**

M<sup>a</sup> Isela Lavilla Beltrán

Benita Pérez Cid

**Idioma en que es impartida:** Castellano

## ***2. Situación, significado e importancia de la materia en el ámbito de la titulación.***

### **2.1. Módulo al que pertenece la materia en el Plan de Estudios. Materias con las que se relaciona.**

Pertenece al Módulo 1 - Formación Obligatoria Avanzada.

Se relaciona con las materias optativas de la especialidad Técnicas Analíticas Avanzadas

### **2.2. Papel que juega este curso en ese bloque formativo y en el conjunto del Plan de Estudios.**

Esta asignatura es clave en el módulo de Formación Obligatoria Avanzada porque completa el estudio de la Química Analítica impartido en el Grado en Química.

### **2.3. Conocimientos previos (recomendados/obligatorios) que los estudiantes han de poseer para cursar la asignatura.**

Conocimientos básicos en Química Analítica.

## ***3. Objetivos del aprendizaje y competencias a alcanzar por el estudiante con la asignatura.***

### **3.1. Objetivos del aprendizaje.**

- Adquisición de una formación completa e integrada de los métodos analíticos utilizados a lo largo de todo el proceso analítico incluyendo el estudio de metodologías para el muestreo, preparación de la muestra, determinación de analitos, y tratamiento e interpretación de resultados.
- Visión general de los métodos analíticos y de su selección y aplicación para la resolución de problemas reales.

### **3.2. Competencias generales.**

- Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
- Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química.
- Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional.
- Ser capaz de trabajar en equipo y adaptarse a equipos multidisciplinares.
- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- Que los/as estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- Que los/as estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

- Que los/as estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

### **3.3. Competencias específicas.**

- Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
- Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas
- Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
- Analizar y utilizar los datos obtenidos de manera autónoma en los experimentos complejos de laboratorio relacionándolos con las técnicas químicas, físicas o biológicas apropiadas, e incluyendo el uso de fuentes bibliográficas primarias.

### **3.4. Competencias transversales.**

- Instrumentales: Capacidad de análisis y síntesis. Capacidad de organización y planificación. Resolución de problemas. Toma de decisiones.
- Personales: Capacidad para trabajar en grupo. Capacidad para comunicar ideas y expresarse de forma correcta oral y escrita. Desarrollo de habilidades para el trabajo en equipo tanto en la resolución como en la discusión de problemas. Iniciación en la capacidad de argumentación con el apoyo de los libros de texto y otras referencias proporcionadas en la asignatura. Iniciación en la capacidad crítica y autocrítica.
- Sistémicas: Desarrollo de habilidades para el aprendizaje autónomo. Adaptación a nuevas situaciones. Creatividad. Liderazgo. Motivación por la calidad.

## **4. Contenidos del curso.**

### **4.1. Epígrafes del curso:**

#### **Contenidos teóricos:**

**Tema 1.** Tendencias de la Química Analítica.

**Tema 2.** Automatización y miniaturización en Química Analítica

**Tema 3.** Optimización y validación de métodos analíticos mediante quimiometría.

### **4.2. Bibliografía recomendada**

#### **4.2.1. Básica (manual de referencia).**

R. Kellner, J. M. Mermet, M. Otto, M. Valcarcel y H. M. Widmer, Eds. "**Analytical Chemistry: A Modern Approach to Analytical Science**".Ed. Wiley-VCH. 2004.

#### **4.2.2. Complementaria.**

Massart D.L., Vandegiste B.G.M., Buydens L.M.C., De Jong S., Lewi P.J., Smeyers-Verbeke, J. "**Handbook of chemometrics and qualimetrics. Part A.**" Elsevier Science. Amsterdam. 1997.

Miller J.C., Miller J.N. "**Estadística y Quimiometría para Química Analítica**".2ª Ed. Prentice Hall. Madrid. 2002.

Ramis Ramos G., García Álvarez-Coque M.C. "**Quimiometría**". Síntesis. Madrid. 2001.

Valcárcel M., Cárdenas M.S. "**Automatización y Miniaturización en Química Analítica**".Ed. Springer. 2000.

## **TEMA 1. Tendencias de la Química Analítica.**

### **1. Sentido del tema (Introducción)**

En este tema se mostrará la panorámica de cómo será la Química Analítica en el futuro desde la perspectiva de la evolución socio-económica, científica y técnica. También se enfatizarán aquellos aspectos globales o básicos que marcarán los cambios previsibles en la Química Analítica y se establecerá el marco general para contextualizar la automatización entre las tendencias de la Química Analítica.

### **2. Epígrafes del tema.**

Introducción. Fines y objetivos de la Química Analítica. Evolución de la Química Analítica. Tendencias genéricas y básicas, y su repercusión.

### **3. Bibliografía**

R. Kellner, J. M. Mermet, M. Otto, M. Valcarcel y H. M. Widmer, Eds. **"Analytical Chemistry: A Modern Approach to Analytical Science"**.Ed. Wiley-VCH. 2004. Capítulo 1, páginas 1-10; Capítulo 35, páginas 1110-1119; y Capítulo 36, páginas 1120-1136.

M. Valcárcel, M. S. Cárdenas **"Automatización y Miniaturización en Química Analítica"**.Ed. Springer. 2000. Capítulo 1, páginas 1-30.

### **4. Actividades a desarrollar.**

En las clases expositivas se verán los conceptos y en el seminario se trabajará con ellos. Elaboración, entrega y presentación de un trabajo. En el seminario correspondiente, los/as alumnos/as presentarán y debatirán sobre su trabajo.

Aquellos/as alumnos/as que tengan especial dificultad con los contenidos desarrollados en este tema deberán contactar con el profesor/a para recibir el apoyo necesario.

## **TEMA 2. Automatización y miniaturización en Química Analítica.**

### **1. Sentido del tema (Introducción)**

Describir las vertientes que implica la automatización en Química Analítica en la actualidad. Abordar críticamente las ventajas e inconvenientes derivados de la sustitución de la participación humana en procesos analíticos. Describir las posibilidades de automatizar las distintas etapas del proceso analítico

### **2. Epígrafes del tema.**

Automatización-Química Analítica. Automatización en las distintas etapas del proceso analítico: operaciones previas, medida y transducción de la señal y toma y tratamiento de datos. Automatización integral.

### **3. Bibliografía**

R. Kellner, J. M. Mermet, M. Otto, M. Valcarcel y H. M. Widmer, Eds. "**Analytical Chemistry: A Modern Approach to Analytical Science**".Ed. Wiley-VCH. 2004. Capítulo 29, páginas 973-984; Capítulo 30, páginas 986-1000; Capítulo 32, páginas 1023-1041 y Capítulo 31, páginas 1001-1021.

M. Valcárcel, M. S. Cárdenas "**Automatización y Miniaturización en Química Analítica**".Ed. Springer. 2000. Capítulo 2, páginas 31-67; Capítulo 3, páginas 68-114; Capítulo 4, páginas 115-146; Capítulo 5, páginas 147-190; Capítulo 7, páginas 220-267.

### **4. Actividades a desarrollar.**

En las clases expositivas se verán los conceptos y en el seminario se trabajará con ellos. Elaboración, entrega y presentación de un trabajo. En el seminario correspondiente, los/as alumnos/as presentarán y debatirán sobre su trabajo.

Aquellos/as alumnos/as que tengan especial dificultad con los contenidos desarrollados en este tema deberán contactar con el profesor/a para recibir el apoyo necesario.

### **TEMA 3. Optimización y validación de métodos analíticos mediante quimiometría.**

#### **1. Sentido del tema (Introducción)**

Se presentan métodos para una experimentación efectiva, basados en el diseño de experimentos y la optimización gráfica y numérica, que puedan ser aplicados indistintamente, mediante ejemplos, a la optimización de una técnica de preparación de muestra, a un método analítico o a la formulación de productos.

Se utilizan los conocimientos químicos adquiridos hasta el momento para la evaluación y verificación de métodos analíticos, mediante el uso de herramientas matemático estadísticas para asegurarse de que producen unos resultados válidos y coherentes con el objetivo previsto..

#### **2. Epígrafes del tema.**

Aplicación de diseño de experimentos, con el fin de obtener información que permita desarrollar nuevos productos y procesos, comprender mejor un sistema (un proceso industrial, un procedimiento analítico,...) y tomar decisiones sobre como optimizarlo y mejorar su calidad. Evaluación y verificación de métodos analíticos cualitativos y cuantitativos utilizando parámetros de validación dentro del marco de la garantía de calidad.

#### **3. Bibliografía**

R. Kellner, J. M. Mermet, M. Otto, M. Valcarcel y H. M. Widmer, Eds. **"Analytical Chemistry: A Modern Approach to Analytical Science"**.Ed. Wiley-VCH. 2004. Part II: Basic Statistics and Chemometrics. Capítulo 7, páginas 91-120; Capítulo 8, páginas 121-227.

Massart D.L., Vandegiste B.G.M., Buydens L.M.C., De Jong S., Lewi P.J., Smeyers-Verbeke, J. **"Handbook of chemometrics and qualimetrics. Part A"**. Elsevier Science. Amsterdam. 1997.

J.C. Miller, J.N. Miller **"Estadística y Quimiometría para Química Analítica "**.2ª Ed. Prentice Hall. Madrid. 2002.

G. Ramis Ramos, M.C. García Álvarez-Coque **"Quimiometría "**. Síntesis. Madrid. 2001.

#### **4. Actividades a desarrollar.**

Aplicación práctica de programas para el tratamiento estadístico y quimiométrico del estudio y la resolución de casos. El profesorado puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos para la resolución de las dudas planteadas.

Aquellos/as alumnos/as que tengan especial dificultad con los contenidos desarrollados en este tema deberán contactar con el profesor/a para recibir el apoyo necesario.



## 5. - Indicaciones metodológicas y atribución de carga ECTS.

### 5.1. Atribución de créditos ECTS.

TRABAJO PRESENCIAL EN EL AULA	HORAS	TRABAJO PERSONAL DEL ALUMNO/A	HORAS
Clases expositivas en grupo grande	18	Estudio autónomo individual o en grupo	15
Clases interactivas en grupo reducido (Seminarios)	2	Resolución de ejercicios, u otros trabajos	20
Tutorías en grupo muy reducido	3	Preparación de presentaciones orales, escritas, elaboración de ejercicios propuestos. Actividades en biblioteca o similar	15
<b>Total horas trabajo presencial en el aula o en el laboratorio</b>	<b>23</b>	<b>Total horas trabajo personal del alumno/a</b>	<b>50</b>

### 5.2. Actividades formativas en el aula con presencia del profesorado

Clases presenciales teóricas. Clases expositivas (utilización de pizarra, ordenador, cañón), complementadas con las herramientas propias de la docencia virtual.

Seminarios realizados con profesorado propio del Máster. Sesiones interactivas relacionadas con las distintas materias con debates e intercambio de opiniones con los alumnos/as.

Resolución de ejercicios prácticos (problemas, cuestiones tipo test, interpretación y procesamiento de la información, evaluación de publicaciones científicas, etc.)

Tutorías individuales o en grupo reducido.

Utilización de programas informáticos especializados e internet. Soporte docente on-line (Campus Virtual).

Estudio personal basado en las diferentes fuentes de información

Realización de las diferentes pruebas para la verificación de la obtención tanto de conocimientos teóricos como prácticos y la adquisición de habilidades y aptitudes.

### 5.3. Recomendaciones para el estudio de la materia

- Es muy importante asistir a las clases expositivas.
- Es fundamental mantener el estudio de la materia "al día".
- Una vez finalizada la lectura de un tema en el manual de referencia, es útil hacer un resumen de los puntos importantes (ver resumen de conceptos importantes en el Manual de referencia).

### 5.4. Calendario de actividades

GRUPO																
Septiembre						Octubre					Noviembre					
	L	Ma	Mi	X	Vi			Mi	X	V		L	Ma	Mi	X	Vi
					5			1	2	3		3	4	5	6	7
09-10																
10-11																
11-12																
12-13																
13-14																
16-218											L3					
	8	9	10	11	12	6	7	8	9	10		10	11	12	13	14
09-10																
10-11																
11-12																
12-13																
13-14																
16-18						L3					S (L3)					
	15	16	17	18	19	13	14	15	16	17		17	18	19	20	21
09-10																
10-11																
11-12																
12-13																
13-14																
16-18	L1				L1						S (L1-2)					
	22	23	24	25	26	20	21	22	23	24		24	25	26	27	28
09-10																
10-11																
11-12																
12-13																
13-14																
16-18	L2				L2											
	29	30														
09-10						T1					T2					
10-11						27	28	29	30	31						
11-12																
12-13																
13-14																
16-18	L3															

  

Diciembre						Otras actividades					Notas									
	L	Ma	Mi	X	Vi	<i>Entrega de trabajos</i>					<i>Exámenes</i>					PM	Presentación de la materia			
	1	2	3	4	5	Semana 09/10 20-24/10					<i>Examen ordinario</i>					L	Clases expositivas (teóricas) L1 (Tema 1), L2, ..., Ln			
09-10						31 Octubre 2014 16 h Aula:					<i>Examen extraordinario</i>						Clases interactivas (Seminarios) G1 (Grupo 1º), G2, ..., Gn			
10-11						<i>Horario de tutorías:</i> M. Carmen Yebra Despacho F. Química											Clases interactivas (tutorías) T1 (Grupo 1º), T2, ..., Tn			
11-12						L-J 12:30-14:00 h											Días no lectivos festivos			
12-13						<i>Horario de tutorías:</i> Antonia Mª Carro Despacho F. Química														
13-14						L-J 12:30-14:00 h														
16-20	8	9	10	11	12															
09-10																				
10-11																				
11-12																				
12-13																				
13-14																				
16-20	15	16	17	18	19															
09-10																				
10-11																				
11-12																				
12-13																				
13-14																				
16-20																				

Clases expositivas: Aula de  
Seminarios:  
Tutorías:

## ***6. Indicaciones sobre la evaluación.***

### **6.1. Procedimiento de evaluación.**

La evaluación de esta materia se hará mediante evaluación continua y la realización de un examen final, estando condicionado el acceso al examen a la participación en al menos el 80% de las actividades docentes presenciales de asistencia obligatoria (seminarios y tutorías).

La evaluación continua (N1) tendrá un peso del 45% en la calificación de la asignatura y constará de dos componentes: clases interactivas en grupo reducido (seminarios) y clases interactivas en grupo muy reducido (tutorías). Los seminarios y las tutorías incluirán los elementos siguientes: resolución de problemas y casos prácticos (10%), realización de trabajos e informes escritos (15%), exposición oral [(trabajos, informes, problemas y casos prácticos), 10%] y preguntas y cuestiones orales durante el curso (10%).

El examen final (N2) versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura.

La calificación del alumno/a se obtendrá cómo resultado de aplicar la fórmula siguiente:

$$\text{Nota final} = 0.45 \times N1 + 0.55 \times N2$$

Siendo N1 la nota numérica correspondiente a la evaluación continua (escala 0-10) y N2 la nota numérica del examen final (escala 0-10).

Los/as alumnos/as repetidores tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la asignatura por primera vez.

### **6.2. Recomendaciones de cara a la evaluación.**

El alumnado debe repasar los conceptos teóricos introducidos en los distintos temas utilizando la bibliografía recomendada y los resúmenes. Aquellos/as alumnos/as que encuentren dificultades importantes a la hora de trabajar las actividades propuestas, deben acudir en las horas de tutoría del profesorado, con el objetivo de que éste pueda analizar el problema y ayudar a resolver dichas dificultades.

### **6.3. Recomendaciones de cara a la recuperación.**

El/la profesor/a analizará con aquellos/as alumnos/as que no superen con éxito el proceso de evaluación, y así lo deseen, las dificultades encontradas en el aprendizaje de los contenidos de la asignatura. También les proporcionará material adicional (cuestiones, ejercicios, exámenes, etc.) para reforzar el aprendizaje de la materia.