CURS 2007-2008

LLICENCIATURA DE QUIMICA

1- DADES DE L' ASSIGNATURA

ASSIGNATURA	(NOM)
CODI **20581**	**Química Analítica Avançada (g1)**
CURS	
QUATRIMESTRE	2º semestre
CREDITS	6
CREDITS TEORICS	4.5
CREDITS PROBLEMES	1.5

2- DADES DEL PROFESSORAT

DEPARTAMENT RESPONSABLE:
QUIMICA

PROFESSOR RESPONSABLE	DESPATX	TELEFON	E-MAIL
Santiago Maspoch	C7/239	5811011	Santiago.Maspoch@uab.es

ALTRES PROFESSORS	DESPATX	TELEFON	E-MAIL
Anna Peguero	C7/219	5811712	Anna.Peguero@uab.es

3- OBJECTIUS DE L' ASSIGNATURA

OBJECTIUS DE L' ASSIGNATURA
Complementar la información sobre herramientas básicas en quimiometría y tratamiento de datos analíticos, así como introducir aspectos generales sobre el anàlisis de trazas, automatización del laboratorio analítico y técnicas cinéticas de anàlisis.

4- PROGRAMA

CLASSES TEORIQUES

1.- **Química Analítica i anàlisi química**: Objectius de la Química Analítica i funció del químic analític. El procés analític. Necessitats futures i noves tendències de la Química Analítica.

2.- **Descripció estadística de la qualitat de les mesures**: Població i mostra. Paràmetres de la població i els seus estimadors. La distribució normal. Intervals de confiança de la mitjana. Procediments gràfics per comprovar la normalitat.

3.- **Introducció a les proves d'hipòtesi**: Hipòtesis nul.la i alternativa. Errors tipus I i II. Proves unilaterals i bilaterals. Comparació de mitjanes de mostres aparellades i de mostres independents. Comparació de variàncies. Prova de Grubbs. Proves de distribució.

4.- **Anàlisi de variància (ANOVA)**: Terminologia. Fonaments del càlcul de l'ANOVA. Comparació d'homogeneïtat de variàncies. L'ANOVA 1 via. ANOVA 2 vies. Intervals de confiança. Repetibilitat i reproductibilitat. Dissenys jerarquitzats.

5.- **Calibratge i regressió aplicada a la línia recta**: Paràmetres de regressió. Validació del model. Heteroscedasticitat. Intervals de confiança i proves d'hipòtesi. Prediccions a partir de l'ajust. Punts anòmals. Aplicacions a la Química Analítica. Correlació.

6.- **Validació de mètodes analítics**: Validació interna i validació per estudis entre laboratoris. Definicions. Aplicació de l'estadística per calcular les característiques del mètode. Exercicis col·laboratius. Exercicis interlaboratoris.

7.- **Introducció al disseny experimental**. Principis bàsics del disseny experimental. Dissenys de *screening*. Dissenys factorials complerts i fraccionats.

8.- **Anàlisi de traces**. Escales de treball. Problemàtica de l'anàlisi de traces. Causes de contaminació de la mostra. Pèrdua d'analit. Dissolució de la matriu.

9.- **Mètodes de preconcentració de traces**. Principis i fonaments de les tècniques. Aplicació a l'anàlisi mediambiental.

10.- **L'automatització del procès analític**: Objectius. Tècniques d'automatització de les diferents etapes del procediment analític. Mètodes automàtics. Classificació. Analitzadors robòtics.

11.- **Automatització al laboratori**: Analitzadors automàtics discontinus. Analitzadors automàtics en continu. Anàlisi per injecció en flux.

12.- **Control analític de processos industrials**: Requeriments operacionals i instrumentals per a entorns agressius. Tècniques de monitorització i control de processos.

13.- **Mètodes cinètics d'anàlisi**: Introducció. Mètodes per a la determinació d'una sola espècie. Mètodes cinètics diferencials per a l'anàlisi de mescles.

14.- **Reaccions catalitzades** : Equacions de velocitat i mecanisme de reacció. Mètode de la velocitat inicial. Mètode diferencial a temps fix i a temps variable. Mètodes enzimàtics.

BIBLIOGRAFIA

D.A. Skoog, F.J. Holler, T.A. Nieman, *Principios de Análisis Instrumental*, MacGraw-Hill, 2001
Contiene una visión moderna y general de los instrumentos y metodologías instrumentales de análisis químico.

G. Ramis y M.C. García. *Quimiometría*, Síntesis, España (2001).
C.Mongay, *Quimiometría*,U. Valencia, 2005
Libros de texto que contienen los aspectos fundamentales de la quimiometria aplicada al anàlisis químico. El libro del Dr. Mongay tiene algunos capitulos más avanzados.

J.C. Miller and J.N. Miller. *Statistics and chemometrics for analytical chemistry* 4rd ed., Prentice Hall, Essex, England (2000). Versión traducida (2002).
Manual clásico del tratamiento estadístico de datos analiticos que contiene una breve pero muy bien planteada introducción a algunos aspectos de la quimiometria

D.L. Massart, B.G.M. Vandegiste, L.M.C. Buydens, S. Dejong, P.J. Lewi and J. Smeyers-Verbeke. *Handbook on Chemometrics and Qualimetrics*, Elsevier, Amsterdam (1997).
Handbook de referencia

J.L. Beltran et. al. *Exercicis d'introducció a la quimiometria amb full de càlcul*. Edicions Universitat de Barcelona. Textos docents 187. (2000).
Colección de problemas resueltos con hojas escel

Ed Morgan, *Chemometrics: Experimental design*, ACOL, London 1991
Libro de texto de la colección de la Open Learning, relativamente simple y con ejemplos químicos

R. Kellner, J.M. Mermet, M. Otto, H.M. Widmer Editors. *Analytical Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim (2004).
Libro de referencia y consulta que contiene, de forma muy concisa, casi todos los aspectos a considerar en la química analítica moderna

NORMES D'AVALUACIÓ

La evaluación de la asignatura se hará en un examen escrito, con preguntas de teoría de tipo test y problemas.