

- 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. Interval 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. Interval de confiança. Repetibilitat i reproductibilitat. Disseny jerarquitzats.
  - 5.- **Calibratge i regressió aplicada a la línia recta:** Paràmetres de regressió. Validació del model. Heterocedasticitat. Interval de confiança i proves d'hipòtesi. Prediccions a partir de l'ajust. Punt anòmal. 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.- **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.
  - 8.- **Mètodes de preconcentració de traces.** Principis i fonaments de les tècniques. Aplicació a l'anàlisi mediambiental.
  - 9.- **L'automatització del procés analític:** Objectius. Tècniques d'automatització de les diferents etapes del procediment analític. Mètodes automàtics. Classificació. Analitzadors robòtics.
  - 10.- **Automatització al laboratori:** Analitzadors automàtics discontinus. Analitzadors automàtics en continu. Anàlisi per injecció en flux.
  - 11.- **Control analític de processos industrials:** Requeriments operacionals i instrumentals per a entorns agressius. Tècniques de monitorització i control de processos.
- Les lliçons següents es podran "no impartir" si han estat explicades en un altre assignatura*
- 12.- **Mètodes cinètics d'anàlisi:** Introducció. Mètodes per a la determinació d'una sola espècie. Mètodes cinètics diferencials per a l'anàlisi de mesclures: mètode de l'extrapolació logarítmica, mètode de les equacions proporcionals. Aplicacions.

- 13.- **Reaccions catalitzades no enzimàtiques:** Equacions de velocitat i mecanisme de reacció. Reaccions tipus Landolt. Catàlisi micel·lar. Mètode de la velocitat inicial. Mètode diferencial a temps fix i a temps variable.

### **Bibliografia**

G. Ramis y M.C. García. *Quimiometria*, Síntesis, España (2001).

J.C. Miller and J.N. Miller. *Statistics and chemometrics for analytical chemistry* 4rd ed., Prentice Hall, Essex, England (2000). Versió traduïda (2002).

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).

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

E.J. Newman, Editor. *Quality in the Analytical Laboratory*, ACOL, Wiley, NY (1995).

R. Kellner, J.M. Mermet, M. Otto, H.M. Widmer Editors. *Analytical Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim (1998).

D.A. Skoog, F.J. Holler y T.A. Nieman. *Principios de Análisis Instrumental*, 5ª edición Mc Graw-Hill, Madrd (2001).