

Química Analítica Avanzada (20581)

1.- Química Analítica y análisis químico: Objetivos de la Química Analítica y función del químico analítico. El proceso analítico. Necesidades futuras y nuevas tendencias de la Química Analítica.

2.- Descripción estadística de la calidad de las medidas: Población y muestra. Parámetros de la población y sus estimadores. La distribución normal. Intervalos de confianza de la media. Procedimientos gráficos por comprobar la normalidad.

3.- Introducción a las pruebas de hipótesis: Hipótesis nula y alternativa. Errores tipo I e II. Pruebas unilaterales y bilaterales. Comparación de medias de muestras emparejadas y de muestras independientes. Comparación de varianzas. Prueba de Grubbs. Pruebas de distribución.

4.- Análisis de varianza (ANOVA): Terminología. Fundamentos del cálculo de la ANOVA. Comparación de homogeneidad de varianzas. La ANOVA 1 vía. ANOVA 2 vías. Intervalos de confianza. Repetibilidad y reproductibilidad. Diseños jerarquizados.

5.- Calibración y regresión aplicada a la línea recta: Parámetros de regresión. Validación del modelo. Heterocelastividad. Intervalos de confianza y pruebas de hipótesis. Predicciones a partir del ajuste. Puntos anómalos. Aplicaciones a la Química Analítica. Correlación.

6.- Validación de métodos analíticos: Validación interna y validación por estudios entre laboratorios. Definiciones. Aplicación de la estadística para calcular las características del método. Ejercicios colaborativos. Ejercicios interlaboratorios.

7.- Análisis de trazas. Escaleras de trabajo. Problemática del análisis de trazas. Causas de contaminación de la muestra. Pérdida de analito. Disolución de la matriz.

8.- Métodos de preconcentración de trazas. Principios y fundamentos de las técnicas. Aplicación al análisis medioambiental.

9.- La automatización del proceso analítico: Objetivos. Técnicas de automatización de las diferentes etapas del procedimiento analítico. Métodos automáticos. Clasificación. Analizadores robóticos.

10.- Automatización al laboratorio: Analizadores automáticos discontinuos. Analizadores automáticos en continuo. Análisis por inyección en flujo.

11.- Control analítico de procesos industriales: Requerimientos operacionales e instrumentales para entornos agresivos. Técnicas de monitorización y control de procesos.

Las lecciones siguientes se podrán “no impartir” si han sido explicadas en otra asignatura

12.- Métodos cinéticos de análisis: Introducción. Métodos para la determinación de una sola especie. Métodos cinéticos diferenciales para el análisis de mezclas: método de la extrapolación logarítmica, método de las ecuaciones proporcionales. Aplicaciones.

13.- Reacciones catalizadas no enzimáticas: Ecuaciones de velocidad y mecanismo de reacción. Reacciones tipos Landolt. Catálisis micelar. Método de la velocidad inicial. Método diferencial a tiempo fijo y a tiempo variable.

Bibliografía

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

J.C. Miller and J.N. Miller. *Statistics and chemometrics for analytical chemistry* 4rd ed., Prentice Hall, Essex, England (2000). Versión traducida (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 docentes 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).