



**CURS 2006-2007**

**LLICENCIATURA DE QUIMICA**

**1- DADES DE L' ASSIGNATURA**

| <b>ASSIGNATURA</b> | <b>(NOM)</b>                    |
|--------------------|---------------------------------|
| CODI 20581         | Química Analítica Avançada (g1) |
| CURS               |                                 |
| QUATRIMESTRE       | 2º semestre                     |
| CREDITS            | 6                               |
| CREDITS TEORICS    | 4.5                             |
| CREDITS PROBLEMES  | 1.5                             |

**2- DADES DEL PROFESSORAT**

| <b>DEPARTAMENT RESPONSABLE:</b> |
|---------------------------------|
| QUIMICA                         |

| <b>PROFESSOR RESPONSABLE</b> | <b>DESPATX</b> | <b>TELEFON</b> | <b>E-MAIL</b>  |
|------------------------------|----------------|----------------|--|
| Santiago Maspoch             | C7/239         | 5811011        | <a href="mailto:Santiago.Maspoch@uab.es">Santiago.Maspoch@uab.es</a> |

| <b>ALTRES PROFESSORS</b> | <b>DESPATX</b> | <b>TELEFON</b> | <b>E-MAIL</b>  |
|--------------------------|----------------|----------------|--|
| Anna Peguero             | C7/219         | 5811712        | <a href="mailto:Anna.Peguero@uab.es">Anna.Peguero@uab.es</a> |

**3- OBJECTIUS DE L'ASSIGNATURA**

| <b>OBJECTIUS DE L'ASSIGNATURA</b>   |
|---|
| Complementar la informació sobre eines bàsiques en quimiometria i tractament de dades analítiques, així com introduir aspectes generals sobre l'anàlisi de traces, automatització del laboratori analític i tècniques cinètiques d'anàlisi. |

## 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. 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. 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. Disseny de *screening*. Disseny factorial complet i fraccionat.
- 8.- **Anàlisi de traces.** Escala 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 procés 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 mesclures: mètode de l'extrapolació logarítmica, mètode de les equacions proporcionals. Aplicacions.
- 14.- **Reaccions catalitzades :** Equacions de velocitat i mecanisme de reacció. Mètode de la velocitat inicial. Mètode diferencial a temps fix i a temps variable.

## BIBLIOGRAFIA

D.A. Skoog, F.J. Holler, T.A. Nieman, *Principios de Análisis Instrumental*, MacGraw-Hill, 2001

Visió moderna i general dels instruments i metodologies instrumentals d'anàlisi química.

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

Llibre de text que conté els aspectes fonamentals de la quimiometria aplicada a l'anàlisi química.

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

Manual clàssic del tractament estadístic de les dades analítiques que conté una breu, tot i que molt ben plantejada introducció d'alguns aspectes 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 referència.

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

Colecció de problemes resolts amb fulles excel.

Ed Morgan, *Chemometrics: Experimental design*, ACOI, London 1991

Llibre de text de la col·lecció de la Open Learning, relativament simple i amb exemples químics.

R. Kellner, J.M. Mermet, M. Otto, H.M. Widmer Editors. *Analytical Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim (2004).

Llibre de referència i consulta que conté, de forma molt concisa, gairebé tots els aspectes a tenir en compte a la química analítica moderna.

## NORMES D'AVUACIÓ

L'avaluació de la assignatura es farà amb un examen escrit, amb preguntes de teoria tipus test i problemes.