

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

<b>Código</b>	42931
<b>Nombre</b>	Calibración, tratamiento de datos y calidad
<b>Ciclo</b>	Máster
<b>Créditos ECTS</b>	2.0
<b>Curso académico</b>	2022 - 2023

**Titulación(es)**

<b>Titulación</b>	<b>Centro</b>	<b>Curso</b>	<b>Periodo</b>
2109 - M.U. en Técnicas Experimentales en Química 11-V.2	Facultad de Química	1	Primer cuatrimestre

**Materias**

<b>Titulación</b>	<b>Materia</b>	<b>Caracter</b>
2109 - M.U. en Técnicas Experimentales en Química 11-V.2	1 - Laboratorio avanzado de Técnicas Experimentales en Química	Obligatoria

**Coordinación**

<b>Nombre</b>	<b>Departamento</b>
ESCUDER GILABERT, LAURA	310 - Química Analítica
SAGRADO VIVES, SALVADOR	310 - Química Analítica

**RESUMEN**

Asignatura dedicada al aprendizaje práctico, en el aula de informática, de las técnicas quimiométricas avanzadas, para su empleo en diversos aspectos de interés en el laboratorio químico tales como la calibración de instrumentos, el tratamiento de datos y el aseguramiento de la calidad.

**CONOCIMIENTOS PREVIOS**



### Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

### Otros tipos de requisitos

Se requieren los conocimientos previos sobre química y trabajo experimental en el laboratorio de química que se imparten en las titulaciones indicadas en el perfil de ingreso recomendado para el estudiante del Máster.

## COMPETENCIAS

### 2109 - M.U. en Técnicas Experimentales en Química 11-V.2

- Ser capaces de trabajar en equipo con eficiencia en su labor profesional o investigadora.
- Ser capaces de acceder a la información necesaria (bases de datos, artículos científicos, etc.) y tener suficiente criterio para su interpretación y empleo.
- Ser capaces de seleccionar y optimizar las variables instrumentales para obtener los mejores parámetros analíticos en las técnicas experimentales estudiadas.
- Ser capaces de emplear las herramientas básicas para el tratamiento de datos experimentales en el laboratorio.
- Realizar estudios relacionados con el análisis y/o la caracterización de sustancias químicas tales como: control de calidad, diseño de protocolos de trabajo para laboratorios, diseño e implementación de procesos de acreditación y validación, diseño y desarrollo de proyectos I+D+I, emisión de informes, certificaciones y/o dictámenes, etc.
- Ser capaces de planificar y gestionar los recursos disponibles de un laboratorio químico, teniendo en cuenta los principios básicos de la calidad, prevención de riesgos, seguridad y sostenibilidad.
- Seleccionar la instrumentación química comercializada apropiada para el estudio a realizar y de aplicar sus conocimientos para utilizarla de manera correcta.
- Elaborar una memoria clara y concisa de los resultados de su trabajo y de las conclusiones obtenidas.

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

*Al finalizar el proceso de enseñanza-aprendizaje, el estudiante deberá ser capaz de:*

1. Utilizar los protocolos de calibración y verificación de instrumentos y validación de procedimientos analíticos.
2. Emplear la estadística relacionada con el establecimiento de un modelo y su calidad.
3. Extraer la información sobre parámetros de calidad de un método y desarrollar el experimental correspondiente.
4. Caracterizar un resultado analítico.
5. Organizar y caracterizar datos multivariantes.



6. Ajustar protocolos de análisis multivariante en función del objetivo del problema.
7. Establecer relaciones entre objetos, variables y objetos-variables.
8. Calibrar, validar y aplicar modelos de regresión multivariante.
9. En relación a los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODSs) en esta asignatura se espera que el alumnado sea capaz de saber aplicar los conocimientos aprendidos para contribuir a garantizar una educación inclusiva, equitativa y de calidad y promover oportunidades de aprendizaje durante toda la vida para todos (ODS 4), de adquirir una sensibilidad especial por una gestión sostenible del agua (ODS 6), de las materias primas y de las fuentes de energía (ODS 7) así como por un desarrollo sostenible y compatible con el medio ambiente (ODSs 11, 12, 13, 14 y 15), además de poder diseñar, seleccionar y/o desarrollar productos, procesos químicos y/o metodologías analíticas eficientes (ODS 7) y que minimicen su impacto sobre el medio ambiente (ODSs 14 y 15), aprovechen materias primas alternativas y generen una menor cantidad de residuos (ODS 11).

## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 1. Calibración de instrumentos y procedimientos para el aseguramiento de la calidad.

- Diseño, evaluación y seguimiento de protocolos de calibración y verificación de instrumentos: cromatógrafos.
- Inferencia y descriptiva en la validación de procedimientos de análisis químico medioambiental, industrial, alimentario y sanitario.
- Ecuación de Horwitz, función incertidumbre y criterios de identificación.
- Caracterización de resultados analíticos obtenidos en procedimientos de análisis medioambiental, industrial, alimentario y sanitario

### 2. Técnicas de análisis multivariante

- Análisis exploratorio de datos medioambientales mediante PCA.
- Caracterización de la calidad del agua potable mediante PCA.
- Caracterización de la calidad del agua de playa mediante PCA.
- Identificación de fraudes alimentarios mediante PLS.
- Análisis multicomponente (Ca, Mg) en agua potable mediante PLS2.
- Estimación anticipada de un analito en función de otros mediante PLS.

**VOLUMEN DE TRABAJO**

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Prácticas en laboratorio	20,00	100
Elaboración de trabajos individuales	6,00	0
Estudio y trabajo autónomo	12,00	0
Lecturas de material complementario	6,00	0
Preparación de actividades de evaluación	6,00	0
<b>TOTAL</b>	<b>50,00</b>	

**METODOLOGÍA DOCENTE****Actividades presenciales**

Las clases de laboratorio se iniciarán con **seminarios** en los que el profesor realizará una pequeña introducción del objetivo, fundamentos y metodología experimental de las prácticas a realizar.

El profesor realizará en el laboratorio las **explicaciones** necesarias sobre el funcionamiento de los instrumentos a utilizar en cada práctica previamente a su uso por parte de los estudiantes y **tutelar**á su uso durante la realización de las prácticas, para reforzar los conocimientos sobre las técnicas empleadas.

Los estudiantes **realizarán las prácticas**, siguiendo los **protocolos o guiones de prácticas** de los que dispondrán y que podrán ser más o menos abiertos en función de cada práctica y de los objetivos específicos a adquirir en cada asignatura.

Las **actividades presenciales** realizadas en el laboratorio formarán parte de la **evaluación continua** del estudiante (Actividades formativas del verifica AF2 y Metodología docente del verifica MD1).

Se realizarán **exámenes escritos** en las fechas previstas en la programación de las **pruebas de evaluación**. (Actividades formativas del verifica AF4 y Metodología docente del verifica MD1)

Las competencias a adquirir a partir de las actividades presenciales son las siguientes:

Básicas y generales: CB7, CG1, CG3

Específicas: CE2, CE3, CE4, CE5 y CE6

**Actividades no presenciales**

Los estudiantes realizarán las **actividades no presenciales** solicitadas por el profesor (memorias, informes de las prácticas, etc.) y las entregarán en la fecha indicada.



Las competencias a adquirir a partir de las actividades no presenciales son las siguientes:

Específicas: CE7

## EVALUACIÓN

**1.-Evaluación continua del estudiante en las clases y seminarios** (*asistencia participativa, manipulación del material y equipos, organización del trabajo, comprensión y empleo del guión de prácticas, realización de cálculos, trabajo en equipo, etc.*)

Durante las sesiones, centradas en la resolución de casos prácticos, se evaluará la asistencia y la participación de los alumnos de forma individual (bien contestando oralmente o por escrito a las cuestiones planteadas por el profesor, bien planteando preguntas cuya contestación sea relevante para el resto del grupo). Entre otras, dichas preguntas incluirán el diseño de protocolos de trabajo, la selección de variables y las herramientas para el tratamiento de datos (Competencias del verifica CE2, CE3, CE5 y CE6). Las sesiones prácticas se realizarán en grupos de trabajo (Competencia del verifica CG1), y se basará en el planteamiento de dudas y revisión de aspectos clave de cara a la correcta planificación del examen (sin empleo del software).

Competencias a evaluar: Específicas: CE2, CE3, CE4, CE5 y CE6

**PONDERACIÓN: 40 %**

**2.-Evaluación de las actividades no presenciales** (*memorias y/o informes de las prácticas entregados*)

Los informes que emitirán los alumnos incluirán las principales conclusiones derivadas del trabajo en el laboratorio (protocolos de trabajo, selección de variables y tratamiento de datos; competencias del verifica CE2, CE5, CE6 y CE7) y se llevarán a cabo en parejas para fomentar el trabajo en equipo (toma de decisiones consensuadas; competencias del verifica CG1 y CE7).

Competencias a evaluar: Específicas: CE7

**PONDERACIÓN 30 %**

**3.-Exámenes escritos** (*basados en los resultados de aprendizaje de la materia y en los objetivos específicos de la asignatura*)

El examen consistirá en la resolución de cuestiones o casos prácticos relacionados con las técnicas estudiadas. (Competencias del verifica CE2, CE4, CE5 y CE6).

Competencias a evaluar: Específicas: CE2, CE4, CE5 y CE6



PONDERACIÓN 30 %

## REFERENCIAS

### Básicas

- EURACHEM Quantifying Uncertainty in Analytical Measurement (2012)  
[https://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/QUAM2012\\_P1.pdf](https://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/QUAM2012_P1.pdf)
- Massart D.L., B.G.M. Vandeginste, L.M.C. Buydens, S. De Jong, P.J. Lewi y J. Smeyers-Verbeke. Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: Part A y B, Elsevier, Amsterdam, 1997.
- Miller J.C. y J.N. Miller. Estadística y Quimiometría para Química Analítica. Pearson Education S.A. Madrid, 2002.
- Molins-Legua C., S. Meseguer-Lloret, Y. Moliner-Martínez y P. Campíns-Falcó. TRAC 2006 25, 282-290.
- Sagrado S., E. Bonet, M.J. Medina y Y. Martín. Manual Práctico de Calidad en los Laboratorios. Enfoque ISO 17025. AENOR 2005.