

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	42931
Nom	Calibratge, tractament de dades i qualitat
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	2.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2109 - M.U. Tècniques Experimentals en Química	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2109 - M.U. Tècniques Experimentals en Química	1 - Laboratori avançat de Tècniques Experimentals en Química	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
ESCUDEU GILABERT, LAURA	310 - Química Analítica
SAGRADO VIVES, SALVADOR	310 - Química Analítica

RESUM

Assignatura dedicada a l'aprenentatge pràctic, en l'aula d'informàtica, de les tècniques quimiomètriques avançades, per al seu ús en diversos aspectes d'interès en el laboratori químic com ara la calibratge d'instruments, el tractament de dades i l'assegurament de la qualitat.

CONEIXEMENTS PREVIS**Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació**

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

**Altres tipus de requisits**

Es requereixen els coneixements previs sobre química i treball experimental en el laboratori de química que s'impartixen en les titulacions indicades en el perfil d'ingrés recomanat per a l'estudiant del Màster.

COMPETÈNCIES (RD 1393/2007) // RESULTATS DE L'APRENTATGE (RD 822/2021)**2109 - M.U. Tècniques Experimentals en Química**

- Ser capaços de treballar en equip amb eficiència en la seua tasca professional o investigadora.
- Ser capaços d'accedir a la informació necessària (bases de dades, articles científics, etc.) i tenir prou criteri per a la seua interpretació i utilització.
- Ser capaços de seleccionar i optimitzar les variables instrumentals per obtenir els millors paràmetres analítics en les tècniques experimentals estudiades.
- Ser capaços d'usar les eines bàsiques per al tractament de dades experimentals al laboratori.
- Realitzar estudis relacionados amb l'anàlisi i / o la caracterització de substàncies químiques com ara: control de qualitat, disseny de protocols de treball per a laboratoris, disseny i implementació de processos d'acreditació i validació, disseny i desenvolupament de projectes I+D+I, emissió d'informes, certificacions i / o dictàmens, etc.
- Ser capaços de planificar i gestionar els recursos disponibles d'un laboratori químic, tenint en compte els principis bàsics de la qualitat, prevenció de riscos, seguretat i sostenibilitat.
- Seleccionar la instrumentació química comercialitzada apropiada per a l'estudi a realitzar i d'aplicar els seus coneixements per utilitzar-la de manera correcta.
- Elaborar una memòria clara i concisa dels resultats del seu treball i de les conclusions obtingudes.

RESULTATS D'APRENTATGE (RD 1393/2007) // SENSE CONTINGUT (RD 822/2021)

Al finalitzar el procés d'ensenyança-aprenentatge, l'estudiant haurà de ser capaç de:

1. Utilitzar els protocols de calibratge i verificació d'instruments i validació de procediments analítics.
2. Emprar l'estadística relacionada amb l'establiment d'un model i la seua qualitat.
3. Extraure la informació sobre paràmetres de qualitat d'un mètode i desenrotllar l'experimental corresponent.
4. Caracteritzar un resultat analític.
5. Organitzar i caracteritzar dades multivariants.
6. Ajustar protocols d'anàlisi multivariant en funció de l'objectiu del problema.
7. Establir relacions entre objectes, variables i objectes-variables.
8. Calibrar, validar i aplicar models de regressió multivariant.
9. En relació amb els Objectius de Desenvolupament Sostenible (ODS) en aquesta assignatura s'espera que l'alumnat siga capaç de saber aplicar els coneixements apresos per contribuir a garantir una educació inclusiva, equitativa i de qualitat i promoure oportunitats d'aprenentatge durant tota la vida



per a tothom (ODS 4), d'adquirir una sensibilitat especial per una gestió sostenible de l'aigua (ODS 6), de les matèries primeres i de les fonts d'energia (ODS 7) així com per un desenvolupament sostenible i compatible amb el medi ambient (ODSs 11, 12, 13, 14 i 15), a més de poder dissenyar, seleccionar i/o desenvolupar productes, processos químics i metodologies analítiques eficients (ODS 7) i que minimitzen el seu impacte sobre el medi ambient (ODSs 14 i 15), aprofiten matèries primeres alternatives i generen una menor quantitat de residus (ODS 11).

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Calibratge d'instruments i procediments per a l'assegurament de la qualitat.

- Disseny, avaluació i seguiment de protocols de calibratge i verificació d'instruments: cromatògrafs.
- Inferència i descriptiva en la validació de procediments d'anàlisi químic mediambiental, industrial, alimentari i sanitari.
- Equació d'Horwitz, funció incertesa i criteris d'identificació.
- Caracterització de resultats analítics obtinguts en procediments d'anàlisi mediambiental, industrial, alimentari i sanitari.

2. Tècniques d'anàlisi multivariant

- Anàlisi explorador de dades mediambientals per mitjà de PCA.
- Caracterització de la qualitat de l'aigua potable per mitjà de PCA.
- Caracterització de la qualitat de l'aigua de platja per mitjà de PCA.
- Identificació de fraus alimentaris per mitjà de PLS.
- Anàlisi multicomponent (Ca, Mg) en aigua potable per mitjà de PLS2.
- Estimació anticipada d'un anàlit en funció d'altres per mitjà de PLS.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Pràctiques en laboratori	20,00	100
Elaboració de treballs individuals	6,00	0
Estudi i treball autònom	12,00	0
Lectures de material complementari	6,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	6,00	0
TOTAL	50,00	



METODOLOGIA DOCENT

Activitats presencials

Les classes de laboratori s'iniciaran amb **seminaris** en què el professor realitzarà una xicoteta introducció de l'objectiu, fonaments i metodologia experimental de les pràctiques a realitzar.

El professor realitzarà en el laboratori les **explicacions** necessàries sobre el funcionament dels instruments a utilitzar en cada pràctica prèviament al seu ús per part dels estudiants i **tutelarà** el seu ús durant la realització de les pràctiques, per a reforçar els coneixements sobre les tècniques emprades.

Els estudiants **realitzaran les pràctiques**, seguint els **protocols o guions de pràctiques** de què disposaran i que podran ser més o menys oberts en funció de cada pràctica i dels objectius específics a adquirir en cada assignatura.

Les **activitats presencials** realitzades en el laboratori formaran part de **l'avaluació contínua** de l'estudiant (Activitats formatives del verifica AF2 i Metodologia docent del verifica MD1).

Es realitzaran **exàmens escrits** de les diferents assignatures en la data prevista en la **programació de les proves d'avaluació** (Activitats formatives del verifica AF4 y Metodologia docent del verifica MD1)

Les competències adquirides a partir de les activitats presencials són les següents:

- Generals: CG1 y CG3
- Específiques: CE2, CE3, CE4, CE5 i CE67

Activitats no presencials

Els estudiants realitzaran les activitats no presencials sol·licitades pel professor (memòries, informes de les pràctiques, etc.) i les entregaran en la data indicada.

Les competències adquirides a partir de les activitats presencials són les següents:

- Específiques: CE7

AVALUACIÓ

1.-Avaluació contínua de l'estudiant en les classes i seminaris (*assistència participativa, manipulació del material i equips, organització del treball, comprensió i utilització del guió de pràctiques, realització de càlculs, treball en equip, etc.*)

Durant les sessions, centrades en la resolució de casos pràctics, s'avaluarà l'assistència i la participació dels alumnes de forma individual (bé contestant oralment o per escrit a les qüestions plantejades pel professor, bé plantejant preguntes la resposta sigui rellevant per a la resta del grup). Entre altres, aquestes preguntes inclouran el disseny de protocols de treball, la selecció de variables i les eines per al tractament de dades (Competències del verifica CE2, CE3, CE5 i CE6). Les sessions pràctiques es realitzaran en grups de treball (Competència del verifica CG1), i es basarà en el plantejament de dubtes i revisió d'aspectes clau de cara a la correcta planificació de l'examen (sense us del programari).



Competències a avaluar: Específiques: CE2, CE3, CE4, CE5 i CE6

PONDERACIÓ 40 %

2.-Avaluació de les activitats no presencials (*memòries i/o informes de les pràctiques entregats*)

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.-Exàmens escrits

(basats en els resultats d'aprenentatge de la matèria i en els objectius específics de la assignatura)

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 %

REFERÈNCIES

Bàsiques

- EURACHEM Quantifying Uncertainty in Analytical Measurement (2012)
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-Lagua 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.

