

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

Codi	34229
Nom	Química analítica II
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	4.5
Curs acadèmic	2015 - 2016

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1108 - Grau de Química	Facultat de Química	2	Segon quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1108 - Grau de Química	6 - Química Analítica	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
GIMENO ADELANTADO, JOSE VICENTE	310 - Química Analítica

RESUM

En l'assignatura "Química analítica I" es tracta d'aspectes bàsics de la química analítica i de l'anàlisi clàssica qualitativa i quantitativa. En l'assignatura "Química analítica II" es continua la formació bàsica en química analítica, centrada en l'anàlisi instrumental.

El desenvolupament dels mètodes analítics basats en l'ús de tècniques instrumentals ha permès que la química analítica pugui afrontar les creixents necessitats i exigències de la societat i del desenvolupament tecnològic. Actualment, aquests mètodes són imprescindibles per abordar la majoria dels problemes analítics.

Es dedica un tema a l'estudi de l'avaluació i la presentació de resultats analítics i un altre tema a estudiar amb detall el calibratge en anàlisi instrumental (univariant), inclosos la regressió lineal i els mètodes d'ajust de rectes, així com els paràmetres analítics relacionats amb el calibratge. A més del calibratge convencional, també s'introdueixen altres mètodes de calibratge útils en alguns casos concrets.



La resta del programa es dedica a l'estudi de les tècniques òptiques espectrals d'anàlisi, es tracta de les tècniques analítiques basades en l'espectroscòpia d'absorció molecular en l'UV/V i en l'infraroig, les tècniques analítiques luminescents basades en l'espectroscòpia d'emissió molecular i les tècniques analítiques basades en l'espectroscòpia atòmica amb flama i amb altres sistemes d'atomització.

En l'assignatura "Laboratori de química analítica II" es reforcen els coneixements i les habilitats adquirits mitjançant la realització de pràctiques de laboratori en les quals s'utilitzaran tècniques analítiques estudiades en Química analítica II.

Els objectius generals de l'assignatura són:

- Que l'estudiant adquireixca una visió global dels diferents tipus de tècniques analítiques instrumentals per aprofundir posteriorment en les que s'estudiaran en aquesta assignatura.
- Que l'estudiant adquireixca una base sòlida en l'ús dels mètodes de calibratge en química analítica que li permeta seleccionar el més adequat per resoldre un problema analític concret, així com en el tractament dels resultats analítics.
- Que l'estudiant adquireixca els coneixements necessaris sobre els fonaments, la instrumentació, la metodologia experimental i les aplicacions de les tècniques òptiques espectrals d'anàlisi per seleccionar la més adequada per a la resolució d'un problema analític concret.
- Que l'estudiant adquireixca les habilitats necessàries per a la realització de càlculs en problemes analítics en què s'utilitzen tècniques instrumentals d'anàlisi.

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

Per poder abordar amb èxit l'assignatura, és convenient que l'estudiant/a tinga una sèrie de coneixements previs que deu haver adquirit en cursar les assignatures del curs anterior i, en especial, la Química analítica I cursada en el primer quadrimestre.

En particular, es requereixen coneixements bàsics sobre el procés analític i coneixements sobre la química de les dissolucions.

COMPETÈNCIES

1108 - Grau de Química

- Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític.



- Demostrar capacitat inductiva i deductiva.
- Demostrar capacitat de gestió i direcció, esperit emprenedor, iniciativa, creativitat, organització, planificació, control, lideratge, presa de decisions i negociació.
- Resoldre problemes de forma efectiva.
- Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.
- Demostrar habilitat per a transmetre informació, idees, problemes i solucions tant a un públic especialitzat com no especialitzat i utilitzant si escau les tecnologies de la informació.
- Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com professional.
- Aprendre de forma autònoma.
- Demostrar capacitat per a adaptar-se a situacions noves.
- Adquirir una sensibilitat permanent per la qualitat i el medi ambient, el desenvolupament sostenible i la prevenció de riscos laborals.
- Demostrar que coneix els aspectes principals de terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.
- Interpretar la variació de les propietats característiques dels elements químics segons la taula periòdica.
- Demostrar que coneix els tipus principals de reacció química i les seues característiques principals associades.
- Demostrar que coneix els principis de termodinàmica i cinètica i les seues aplicacions en química.
- Demostrar que coneix els principis, els procediments i les tècniques per a la determinació, la separació, la identificació i la caracterització de compostos químics.
- Demostrar que coneix la metrologia dels processos químics, incloent-hi la gestió de qualitat.
- Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.
- Resoldre problemes qualitatius i quantitatius segons models desenvolupats prèviament.
- Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.
- Avaluar, interpretar i sintetitzar les dades i la informació Química.
- Manipular amb seguretat els productes químics.
- Dur a terme procediments experimentals estàndards interessats en treballs analítics i sintètics, en relació amb sistemes orgànics i inorgànics.
- Manejar la instrumentació química utilitzada en les diferents àrees de la Química.
- Interpretar les dades procedents d'observacions i mesures en el laboratori en termes de la seua significació i de les teories que la sustenten.



- Valorar els riscos en l'ús de substàncies químiques i procediments de laboratori.
- Relacionar teoria i experimentació.
- Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.
- Comprendre els aspectes qualitatius i quantitatius dels problemes químics.
- Desenvolupar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.
- Relacionar la química amb altres disciplines.
- Que els estudiants sàpien aplicar els seus coneixements al seu treball o vocació d'una forma professional i posseïsquen les competències que solen demostrar-se per mitjà de l'elaboració i defensa d'arguments i la resolució de problemes dins de la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants tinguen la capacitat d'arreglar i interpretar dades rellevants (normalment dins de la seua àrea d'estudi) per emetre judicis que incloguen una reflexió sobre temes rellevants d'índole social, científica o ètica.
- Que els estudiants puguin transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.
- Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.
- Expressar-se correctament, tant en forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.
- Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

En aquesta assignatura s'abordaran els resultats d'aprenentatge següents continguts en el document de grau, dins la matèria Química Analítica:

- Disposar dels coneixements teòrics i pràctics necessaris per planificar, aplicar i gestionar la metodologia analítica més adequada per abordar problemes d'índole mediambiental, sanitari, industrial, alimentari o de qualsevol índole relacionada amb substàncies químiques. (CG8, CG10, CE4, CE15, CE24, CE26)
- Demostrar coneixement i destresa en els principis, procediments i principals tècniques instrumentals usades en química per a la determinació, la separació, la identificació caracterització i el comportament de compostos químics. (CE6, CE8, CE19, CE24)
- Explicar de manera comprensible fenòmens i processos relacionats amb la química analítica. (CG1, CG2, CE2, CE13)
- Comprendre i utilitzar amb rigor la informació bibliogràfica i tècnica referida als processos químics analítics. (C14, CE16)



- Comprendre i usar eficaçment les diferents formes de mesura per a l'estudi dels processos químics i de les tècniques instrumentals utilitzades per conèixer el comportament de les espècies químiques. (CE1, CE10)
- Reconèixer i valorar el comportament de les substàncies químiques en la vida diària. (CE23)
- Usar la informació tècnica per decidir la metodologia a usar per resoldre un problema real. (CG3, CG4)
- Aplicar criteris de qualitat dels resultats analítics. (CG10)
- Demostrar coneixement de les metodologies analítiques sostenibles. (CE25)
- Disposar dels coneixements teòrics i pràctics necessaris per abordar la gestió de residus químics i de seguretat al laboratori. (CE17, CE21)
- Poder explicar de manera comprensible fenòmens experimentals amb les teories que els sustenten. (CE20, CE22)
- Desenvolupar procediments experimentals per a l'anàlisi de compostos orgànics i inorgànics. (CE18)
- Demostrar destresa en el tractament i la propagació d'errors de les magnituds amidades al laboratori i destresa en el maneig de programes informàtics per realitzar el tractament de dades experimentals. (CE16, CT3)
- Demostrar capacitat per elaborar registres, informes i procediments normalitzats de treball d'una pràctica de laboratori. (CG3, CG7, CG9, CE10, CT1)
- Demostrar habilitats en les relacions interpersonals i amb perspectiva de gènere. (CG6)
- Demostrar sensibilitat per qüestions mediambientals. (CG10)
- Demostrar capacitat de gestió de la informació amb rigor. (CG7)
- Demostrar capacitat de lideratge i amb perspectiva de gènere. (CG3)
- Realitzar eficaçment les tasques assignades com a membre d'un equip amb perspectiva de gènere. (CG3)
- Resoldre problemes amb rigor. (CG4, CG6, CE14, CE15, CE24)

Aquests resultats d'aprenentatge han de permetre que, en acabar l'assignatura de Química analítica II, l'estudiant/a ha de ser capaç de:

- Classificar les tècniques analítiques instrumentals més utilitzades.
- Indicar els criteris bàsics per a l'elecció d'una tècnica analítica instrumental.
- Definir errors sistemàtics i aleatoris, diferenciar-los i descriure la seua relació amb les propietats analítiques.
- Expressar correctament un resultat analític.
- Aplicar assajos d'hipòtesis senzilles, com, per exemple, rebuig de resultats anòmals, comparació de variàncies, comparació d'un resultat amb un valor de referència i/o comparació de dos resultats.



- Justificar la necessitat de l'ús de calibratge en anàlisi instrumental.
- Explicar les característiques de l'ajust de rectes pel mètode de mínims quadrats simple i ponderats. Indicar els paràmetres de calibratge de major interès i la seua relació amb les característiques analítiques dels mètodes instrumentals.
- Descriure els diferents tipus de calibratge (convencional, patró intern, addició de patró), establir les seues diferències i l'aplicabilitat.
- Resoldre problemes analítics basats en l'ús de tècniques de calibratge
- Explicar el fonament teòric de les diferents tècniques analítiques estudiades.
- Escriure i interpretar la relació entre el senyal analític obtingut en cadascuna de les tècniques analítiques estudiades i la concentració de l'anàlit.
- Dibuixar esquemàticament el disseny de la instrumentació corresponent a les diferents tècniques analítiques estudiades en l'assignatura, explicar-ne els components i justificar-ne la necessitat i la posició en el context del disseny.
- En els casos en què hi ha diferents dissenys de la instrumentació per a una mateixa tècnica analítica o grups de tècniques, explicar-ne les diferències.
- Descriure la metodologia experimental per seguir en l'anàlisi mitjançant les diferents tècniques analítiques estudiades.
- Indicar els tipus d'interferències més habituals en les tècniques analítiques estudiades i els procediments per corregir-les.
- Esmentar exemples representatius de les aplicacions de les tècniques analítiques estudiades.
- Donat un exemple concret d'aplicació o un article publicat sobre un mètode analític aplicat a una mostra concreta, justificar-ne la utilitat, comentar-ne les característiques analítiques, explicar raonadament les etapes del procediment per seguir i indicar com s'haurien de fer els càlculs. Realitzar els càlculs necessaris per a la resolució de problemes analítics, expressar-ne correctament el resultat i explicar les conclusions que se n'obtenen.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Introducció a les tècniques instrumentals d'anàlisi.

Evolució conceptual de l'anàlisi instrumental. Classificació de les tècniques instrumentals d'anàlisi. Tècniques espectroscòpiques d'anàlisi. Criteris per a l'elecció de la tècnica instrumental. Disseny i components bàsics dels instruments utilitzats en espectroscòpia analítica.

2. Avaluació i presentació de resultats

Error sistemàtic i aleatori. Funcions de distribució. Interval de confiança i expressió de resultats. Hipòtesi nul·la i hipòtesi alternativa. Assajos d'hipòtesi bàsics: rebuig de resultats anòmals, comparació d'un conjunt de dades amb un valor de referència i comparació de dos conjunts de dades.



3. Calibratge

Concepte de calibratge i la seua importància en l'anàlisi instrumental. Calibratge convencional o extern. La regressió lineal. Ajustaments per mínims quadrats simples i ponderats. Paràmetres analítics relacionats amb el calibratge. Sensibilitat, límit de detecció, límit de quantificació. Determinació de la concentració d'un anàlit en una mostra usant una corba de calibratge. Calibratge usant un patró intern. Detecció i correcció d'interferències proporcionals degudes a aquest efecte matriu usant calibratge mitjançant addició d'un patró.

4. Introducció a les tècniques espectroscòpiques d'anàlisi. Espectroscòpia d'absorció molecular en l'UV/V

Introducció a les tècniques espectroscòpiques d'anàlisi. Espectroscòpia d'absorció molecular en l'UV/V. Espectres atòmics i moleculars: la seua utilització en anàlisi instrumental. Fonaments de l'espectroscòpia d'absorció molecular en l'UV/V. Llei de Beer i condicions d'aplicació. Factors que influeixen sobre l'absorció molecular en l'UV/V. Ús analític de l'espectrofotometria UV/V. Instrumentació i variables d'interès. Metodologia experimental. Interferències i mètodes per a la seua correcció. Resolució de mesclures: sistemes d'equacions lineals. Ús d'espectres derivats. Aplicacions analítiques de major interès en l'actualitat. Criteris per a la lectura de publicacions sobre mètodes analítics basats en l'espectrofotometria UV/V.

5. Espectroscòpia d'emissió molecular

Fonaments de l'espectroscòpia d'emissió molecular. Espectres d'excitació i d'emissió. Fluorescència i fosforescència. Factors que influeixen sobre la fluorescència i la fosforescència i interferències. Ús analític de les tècniques luminescents. Instrumentació i variables d'interès. Metodologia experimental. Altres tècniques luminescents: ús analític de la quimioluminescència. Aplicacions analítiques de major interès en l'actualitat. Criteris per a la lectura de publicacions sobre mètodes analítics basats en tècniques luminescents. Comparació entre les tècniques d'espectroscòpia molecular d'absorció i emissió estudiades.

6. Espectroscòpia atòmica I

Fonaments de l'espectroscòpia atòmica. El procés d'atomització. Ús analític de l'espectroscòpia atòmica. Tècniques basades en l'atomització mitjançant flama: absorció i emissió atòmiques. Instrumentació i variables d'interès. Metodologia experimental. Tipus d'interferències i mètodes per a la seua correcció.

7. Espectroscòpia atòmica II



Absorció atòmica usant atomització electrotèrmica: instrumentació i variables d'interès; metodologia experimental; interferències i la seua correcció. Absorció atòmica usant tècniques de vapor fred i de generació d'hidrurs: instrumentació i variables d'interès; metodologia experimental; interferències i la seua correcció. Fluorescència atòmica. Emissió atòmica usant atomització mitjançant plasma acoblat inductivament. Instrumentació i variables d'interès; metodologia experimental; interferències i la seua correcció. Comparació entre les tècniques atòmiques estudiades. Aplicacions analítiques de les tècniques atòmiques de major interès en l'actualitat. Criteris per a la lectura de publicacions sobre mètodes analítics basats en tècniques atòmiques.

8. Espectroscòpia d'absorció molecular en l'infraroig

Fonaments de l'espectroscòpia infraroja. Vibracions moleculars i teoria de grups. Factors que afecten l'acoblament vibracional. Ús analític de l'espectroscòpia infraroja. Instrumentació i variables d'interès. Metodologia experimental. Tècniques de mostreig i manipulació de la mostra. Espectroscòpia infraroja amb transformada de Fourier. Espectroscòpia en l'infraroig llunyà. Espectroscòpia en l'infraroig pròxim. Reflectància total atenuada. Aplicacions analítiques de major interès en l'actualitat. Criteris per a la lectura de publicacions sobre mètodes analítics basats en l'espectroscòpia infraroja.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	38,00	100
Tutories reglades	7,00	100
Estudi i treball autònom	42,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	25,50	0
TOTAL	112,50	

METODOLOGIA DOCENT

Aquesta assignatura inclou classes presencials de teoria, així com activitats presencials de tutories grupals i seminaris.

En les classes de teoria es donarà una visió global del tema per tractar i s'assentaran les bases per a la resolució de problemes tipus relacionats amb els continguts teòrics.

En les tutories es treballarà en la resolució de problemes i/o qüestions relacionats amb la teoria.

En els seminaris es treballarà en la resolució de casos pràctics relacionats amb les tècniques analítiques instrumentals tractades en les classes de teoria.

Per a l'avaluació de les activitats realitzades per l'estudiant el professor podrà:



- avaluar els treballs presencials i no presencials.
- avaluar la participació positiva en les classes: rendiment del treball, resposta a les qüestions plantejades, exposició, etc.

AVALUACIÓ

L'avaluació de l'aprenentatge dels estudiants tindrà en compte tots els aspectes exposats en l'apartat de metodologia d'aquesta guia docent.

PRIMERA CONVOCATÒRIA

Qualificació final :

Activitats realitzades per l'estudiant (qüestions, exercicis, proves d'avaluació, etc)	Examen
30%	70%

La qualificació mínima obtinguda en l'examen haurà de ser igual o superior a 4,5 per fer la mitjana amb les activitats.

La qualificació mínima obtinguda en les activitats haurà de ser igual o superior a 5 per fer la mitjana amb l'examen.

La qualificació global mínima per aprovar l'assignatura és 5,0.

Els estudiants que no realitzen al llarg del curs el mínim d'activitats requerides pel professor o que obtenen una qualificació de les activitats realitzades inferior a 5,0, seran avaluats únicament amb l'examen, que en aquest cas puntuarà el 100% de la qualificació final. Igualment, també podran ser avaluats únicament amb l'examen els estudiants que així ho manifesten.

SEGONA CONVOCATÒRIA

En la segona convocatòria, la qualificació s'obtindrà aplicant els mateixos criteris que en la primera convocatòria.



REFERÈNCIES

Bàsiques

- SKOOG, D.A.; WEST, D.M.; HOLLER, F.J. Y CROUCH, S.R. Fundamentos de Química Analítica, 8ª edición. Madrid: Thomson-Paraninfo, 2005. ISBN: 9788497323338
- SKOOG, D.A.; HOLLER, F.J. Y NIEMAN, T.A. Principios de Análisis Instrumental, 5ª Edición. Madrid: McGraw-Hill, 2001. ISBN 8448127757
- HARRIS, D.C. Análisis Químico Cuantitativo, 3ª Edición. Barcelona: Reverté, 2007. ISBN 9788429172249
- HARVEY, D. Química Analítica moderna. Madrid: McGraw-Hill, 2002. ISBN 9788448136352
- HERNÁNDEZ, L. Y GONZÁLEZ-PÉREZ, C. Introducción al Análisis Instrumental. Barcelona: Ariel Ciencia, 2002. ISBN 8434480433
- MILLER, J.N. Y MILLER, J.C. Estadística y Quimiometría para Química Analítica. Madrid: Prentice Hall, Pearson Educación, 2002. ISBN 8420535141
- RÍOS CASTRO, A.; MORENO, M.C. Y SIMONET SUAU, B. M. (coords.) Técnicas espectroscópicas en Química Analítica, 2 vols. Madrid: Biblioteca de Químicas. Síntesis. Madrid, 2012. ISBN 9788499589312