FITXA IDENTIFICATIVA

Dades de l'Assignatura	
Codi	34230
Nom	Química analítica III
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2017 - 2018

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1108 - Grau de Química	Facultat de Química	3	Primer quadrimestre

Matèries

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

Coordinació

Nom	Departament
CHISVERT SANIA, ALBERTO	310 - Química Analítica

RESUM

Es vol que l'estudiant amplie convenientment la visió global dels diferents tipus de tècniques analítiques instrumentals, completant-lo amb les tècniques electroanalítiques, de separació i acoblades. Que adquirisca una base sòlida en la seua capacitat per seleccionar mètodes analítics basats en les tècniques estudiades en cursos anteriors i completades aquest curs. Que siga capaç d'abordar el tractament de dades univariants, bivariants i multivariants mitjançant les tècniques més habituals de l'estadística, amb la independència i l'esperit crític que ha de proporcionar un coneixement suficient dels fonaments d'aquesta subdisciplina.

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 lassignatura, és convenient que lestudiant/a tinga una sèrie de coneixements previs que deu haver adquirit en cursar les assignatures dels cursos anteriors. En particular es requereixen coneixements bàsics sobre el procés analític i la mesura en química analítica, així com coneixements sobre la química de les dissolucions, i coneixement sobre tècniques espectroscòpiques i maneig de dades univariants (calibratge), i sobre característiques significatives dels mètodes analítics.

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 public 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.
- 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.
- 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'arreplegar 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 puguen 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'APRENENTATGE

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

1. 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, CE15, CE24, CE26)

2. Demostrar coneixement i destresa en els principis, els procediments i les principals tècniques instrumentals usades en química per a la determinació, la separació, la identificació, la caracterització i el comportament de compostos químics. (CE4, CE6, CE8, CE19, CE24)

3. Explicar de manera comprensible fenòmens i processos relacionats amb la química analítica. (CG1, CG2, CE2, CE13, CT1)

4 . Comprendre i utilitzar amb rigor la informació bibliogràfica i tècnica referida als processos químics analítics. (CG7, CE16)

5. Comprendre i usar eficaçment les diferents formes de mesura per a l'estudi dels processos químics i tècniques instrumentals utilitzades per conèixer el comportament de les espècies químiques. (CE1,CE10)

6. Reconèixer i valorar el comportament de les substàncies químiques en la vida diària (CE23)

7. Usar la informació tècnica per decidir la metodologia per utilitzar en la resolució d'un problema real. (CG3,CG4)

9. Demostrar coneixement de les metodologies analítiques sostenibles (CE25)

10. Disposar dels coneixements teòrics i pràctics necessaris per abordar la gestió de residus químics i de seguretat al laboratori. (CE17, CE21)

11. Poder explicar de manera comprensible fenòmens experimentals amb les teories que els sustenten. (CE20, CE22)

13. Demostrar destresa en el tractament i la propagació d'errors de les magnituds mesurades al laboratori i destresa en el maneig de programes informàtics per realitzar el tractament de dades experimentals. (CE16, CT3)

14. Demostrar habilitats en les relacions interpersonals i amb perspectiva de gènere. (CG6)

15. Demostrar sensibilitat per assumptes mediambientals. (CG10)

16. Demostrar capacitat de gestió de la informació amb rigor. (CG7)

17. Demostrar capacitat de lideratge i amb perspectiva de gènere (CG3)

18. Realitzar eficaçment les tasques assignades com membre d'un equip i amb perspectiva de gènere (CG5)

19. Resoldre problemes amb rigor (CG4, CG6, CE14, CE15, CE24)

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

• Indicar els criteris bàsics per a l'elecció d'una tècnica analítica instrumental, o de separació, en aquest cas, amb inclusió de la selecció de condicions de treball i de detecció.

• Descriure i interpretar 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 les tècniques per corregir-los.

• Esmentar exemples representatius de les aplicacions de les tècniques analítiques estudiades.

• Donat un exemple teòric 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 realitzar els càlculs.

• Realitzar els càlculs necessaris per a la resolució de problemes analítics basats en l'ús de les tècniques analítiques estudiades, expressar-ne correctament el resultat i explicar les conclusions que se n'obtenen.

• Tractar les dades amb tècniques estadístiques uni-, bi-i multivariants, i ser capaç d'expressar-ne gràficament i numèricament els resultats, així com interpretar-los correctament.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Introducció als mètodes electroanalitics

Cel·les electroquímiques. Potencials de cel·la i d'elèctrode. Reaccions electròdiques. Polarització. Mecanismes de transport. Aspectes termodinàmics i cinètics. Reversibilitat. Classificació dels mètodes electroanalítics.

2. Potenciometria

Elèctrodes de referència. Elèctrodes indicadors, tipus. Potencials. Elèctrodes de membrana. Mesures potenciomètriques directes. Mesura del pH. Cel·la de mesura. Elèctrodes selectius. Calibratge. Valoracions potenciomètriques.

3. Voltamperometria

Elèctrodes de treball. Instrumentació bàsica. Classificació dels mètodes voltamperomètrics. Aspectes qualitatius i quantitatius. Polarografia. L'ona polarogràfica, el corrent de difusió, l'equació d'Ilkovic. Limitacions. Voltamperometria d'impulsos. Paràmetres. Avantatges. Voltamperometria de redissolució. Classificació. Etapes. Comparació entre els mètodes voltamperomètrics. Valoracions amperomètriques.

4. Introducció a les tècniques de separació

Concepte de separació analítica i classificació de tècniques de separació. Extracció líquid-líquid. Característiques dels dissolvents habituals. Teoria de l'extracció líquid-líquid: constant de repartiment, factor de capacitat i raó de distribució. Problemes numèrics d'extracció. Extracció en fase sòlida, concepte i classificació (líquid-sòlid, sòlid-sòlid i gas-sòlid). La SPE com a tècnica de preconcentració. Les fases enllaçades. Fases habituals i repartiment en fase normal, inversa i HILIC. Fases habituals i retenció en intercanvi iònic.

5. Tècniques analítiques de separació

Concepte de cromatografia i classificació de tècniques cromatogràfiques. Modes d'elució. Paràmetres fonamentals en cromatografia d'elució zonal: geomètrics, operatius i característics dels soluts. Introducció a les dues teories de la cromatografia. Teoria de l'equilibri, la màquina de Craig. Concepte de HETP. Teoria dinàmica, l'equació de velocitat. Mesura experimental de l'eficàcia. Resolució i factor de selectivitat. Relació entre resolució i retenció. Característiques generals dels detectors utilitzats en cromatografia: mesura del LOD a partir del soroll de fons. Rang dinàmic lineal, límits, variables qualitatives i quantitatives. Mètodes quantitatius.

6. Cromatografia de gasos

Introducció i esquema del cromatògraf de gasos. Camp d'aplicació, derivatitzacions habituals en GC. Injecció de la mostra amb/sense derivació i directa en columna. Injectors PTV. Fases estacionàries habituals. Propietats. Tipus de columnes. Columnes capil·lars. Criteris de selecció. El detector d'ionització de flama (FID). Detectors fotomètric de flama. Detectors NPD i PSD. El detector de captura electrònica. Elució a temperatura programada. Identificació en cromatografia de gasos.

7. Cromatografia de líquids dalta resolució

El cromatògraf de HPLC. L'injector manual i l'automàtic. La bomba de doble pistó. Els mòduls de mescla a baixa i alta pressió. Característiques. Les columnes: tipus i criteris de selecció. Detectors en cromatografia líquida. Classificació. Detecció espectrofotomètrica. Classificació de la cromatografia líquida d'acord amb el mecanisme de retenció. Selecció de les fases mòbil i estacionaria (I): control de la força d'elució. Selecció de les fases mòbil i estacionària (II): control de la selectivitat. Elució isocràtica i en gradient. L'equilibri d'intercanvi iònic: coeficients de selectivitat. La detecció conductimètrica. Detecció fotomètrica indirecta. Selectivitat de la resposta. La supressió aniònica.

8. Hibridació GC-MS i HPLC-MS

Components bàsics dels detectors de masses. Sistemes d'introducció de mostres. Fonts de ionització. Analitzadors. Detectors. Modes de treball i característiques de les dades. Hibridació GC-MS. La hibridació HPLC-MS. Interfícies habituals i camp d'aplicació.

9. Introducció a la quimiometria multivariable

Objectes i variables. Tipus de variables. La matriu objectes-variables i la seua transposada. Preprocessament de dades. Matriu variància-covariància. Matriu de correlacions. Classificació de les tècniques quimiomètriques multivariables. Anàlisi d'agrupaments. Anàlisi de components principals (PCA).

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	51,00	100
Tutories reglades	9,00	100
Elaboració de treballs en grup	13,00	0
Elaboració de treballs individuals	7,00	0
Estudi i treball autònom	18,00	0
Lectures de material complementari	6,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	21,00	0
Preparació de classes de teoria	8,00	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	8,00	0
Resolució de casos pràctics	9,00	0
TOTAL	**150,00**	

METODOLOGIA DOCENT

El desenvolupament de l'assignatura s'estructura al voltant de:

• Classes presencials amb el grup complet:

Per a les classes teòriques es combinarà el model expositiu/lliçó magistral amb models d'aprenentatge cooperatiu. En les lliçons magistrals, el professor oferirà una visió global del tema tractat, incidirà en aquells conceptes clau per a la comprensió i respondrà els eventuals dubtes o qüestions. Per afavorir la consecució dels objectius d'aprenentatge plantejats, s'introduiran activitats encaminades a afavorir l'aprenentatge cooperatiu i la participació dels estudiants. Per a l'estudi individual i la preparació dels temes en profunditat es proporcionarà bibliografia bàsica i complementària.

En les classes pràctiques sobre resolució de problemes i qüestions s'aplicaran els coneixements teòrics adquirits. El professor exposarà les bases necessàries perquè l'estudiant aprenga a identificar els elements essencials del plantejament i les tècniques per abordar la resolució, usant-hi exemples de problemes tipus.

• Tutories presencials amb cada subgrup:

En aquestes, el professor orientarà l'estudiant sobre tots els elements que conformen el procés d'aprenentatge, tant pel que fa a plantejaments de caràcter global com a qüestions concretes. Així mateix, els estudiants resoldran a classe problemes, qüestions o altres treballs proposats pel professor i es corregirà o s'exposarà una selecció d'aquests. A més, el professor proporcionarà també altres enunciats de problemes i qüestions sense resoldre perquè l'estudiant puga treballar-hi a casa, i resoldre posteriorment els possibles dubtes.

Seminaris-Conferències:

Els Seminaris-Conferències versaran sobre aspectes complementaris de la seva formació en Química Analítica. Per a aquesta tasca, els estudiants assistiran a l'acte i contestaran un qüestionari preparat pel professor.

AVALUACIÓ

L'avaluació de l'aprenentatge dels estudiants tindrà en compte tots els aspectes exposats en l'apartat de Metodologia d'aquesta guia docent. L'assistència i complementació del qüestionari del Seminari-Conferència tindrà una equivalència d'una tutoria. The student activities are not recoverable. Students may submit a request in writing to be evaluated only by examination.

PRIMERA CONVOCATÒRIA

Qualificació final: examen 70% + activitats realitzades pels estudiants 30%

La qualificació mínima en cadascuna d'aquestes dues parts haurà de ser igual o superior a 4,5 per fer la mitjana.

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

SEGONA CONVOCATÒRIA

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

REFERÈNCIES

Bàsiques

- SKOOG, D.A.; HOLLER, F.J. Y NIEMAN, T.A. Principios de Análisis Instrumental, 5ª Edición. Madrid: McGraw-Hill, 2001. ISBN 8448127757
- HARVEY, D. Química Analítica moderna. Madrid: McGraw-Hill, 2002.ISBN 9788448136352
- HARRIS, D.C. Análisis Químico Cuantitativo, 3ª Edición. Barcelona: Reverté, 2007. ISBN 9788429172249

- 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
- MILLER, J.N. Y MILLER, J.C. Estadística y Quimiometría para Química Analítica. Madrid: Prentice Hall, Pearson Educación, 2002. ISBN 8420535141
- KELLNER, R.; MERMET, J.M.; OTTO, M.; VALCÁRCEL, M. Y WIDMER, H.M. Analytical Chemistry: a modern approach to analytical science, 2ª edición. Winheim: Wiley-VCH, 2004. ISBN 3527305904
- RAMIS, G. Y GARCÍA ALVAREZ-COQUE, M.C. Quimiometria. Madrid: Síntesis, 2001. ISBN 8477389047