

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

Codi	34230
Nom	Química analítica III
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química	Facultat de Química	3	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química	6 - Química Analítica	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
MEDINA HERNANDEZ, MARIA JOSE	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 adquireixca 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****1934 - Doble Grau en Química i Enginyeria Química :****1110 - Grau de Química :****1108 - Grau en Química :****1929 - Doble Grau Física i Química :**

R4-OBLIGACIÓ D'HAYER SUPERAT PRÈVIAMENT L'ASSIGNATURA

34183 - Química general I

34184 - Química general II

34183 - Química general I

34184 - Química general II

34183 - Química general I

34184 - Química general II

34183 - Química general I

34184 - Química general II

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 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 (RD 1393/2007) // RESULTATS DE L'APRENENTATGE (RD 822/2021)**1110 - Grau de Química**

- Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític.
- 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.
- 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 quantitativs 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 quantitativs 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 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 D'APRENTATGE (RD 1393/2007) // SENSE CONTINGUT (RD 822/2021)

L'apartat anterior recull les competències contingudes en el document VERIFICA. En aquesta assignatura s'aborden part dels resultats d'aprenentatge de la matèria Química Analítica que permeten adquirir, tant coneixements específics de Química, com habilitats i competències cognitives i competències generals recomanades per l'EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) per al *Chemistry Eurobachelor® Label*. A la següent taula es relacionen els resultats d'aprenentatge adquirits en l'assignatura de Química Analítica III relacionats amb les competències del grau en Química.

CONEIXEMENTS ESPECÍFICS DE QUÍMICA	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
	Competències de l'assignatura Química Analítica III que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Els principis i els procediments utilitzats en anàlisi química i la caracterització dels compostos químics.	Demostrar que coneix els principis, els procediments i les tècniques per a la determinació, la separació, la identificació i la caracterització de compostos químics. (CE8) Demostrar que coneix la metrologia dels processos químics, incloent-hi la gestió de qualitat.(CE10) Manejar la instrumentació química utilitzada en les diferents àrees de la Química.(CE19). Comprendre els aspectes qualitius i



	quantitatius dels problemes químics.(CE24). Desenvolupar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.(CE25)
--	--

COMPETÈNCIES I HABILITATS COGNITIVES	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
	Competències de l'assignatura Química Analítica III que contemplem els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Capacitat per a demostrar coneixement i comprensió dels fets, conceptes, principis i teories fonamentals relacionades amb els temes esmentats anteriorment.	Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.(CE13).
Capacitat per a aplicar aquest coneixement i comprensió a la solució de problemes comuns qualitatiu i quantitativ.	Resoldre problemes qualitatiu i quantitativ segons models desenvolupats prèviament.(CE14). Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.(CE15). Comprendre els aspectes qualitatiu i quantitativ dels problemes químics.(CE24).
Competències per a l'avaluació, interpretació i síntesi d'informació i dades químiques.	Avaluar, interpretar i sintetitzar les dades i la informació Química.(CE16). Interpretar les dades procedents d'observacions i mesures en el laboratori en termes de la seua significació i de les teories que la sustenten.(CE20).
Competències per a presentar i argumentar temes científics de	Relacionar la química amb altres disciplines.(CE26).



forma oral i escrita a una audiència especialitzada.	Elaborar informes, peritacions i projectes industrials i ambientals en l'àmbit químic.(CE27). 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.(CG6). Que els estudiants puguin transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.(CB4).
Capacitat per al càlcul i el processament de dades, relacionats amb informació i dades de química.	Resoldre problemes qualitius i quantitius segons models desenvolupats prèviament.(CE14).
	Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.(CE15).

COMPETÈNCIES I HABILITATS RELACIONADES AMB LA PRÀCTICA DE LA QUÍMICA**El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:**

	Competències de l'assignatura Química Analítica III que contempnen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Capacitat per a interpretar dades derivades de les observacions i mesures de laboratori en termes de la seva rellevància, i relacionar-los amb la teoria adequada.	Interpretar les dades procedents d'observacions i mesures en el laboratori en termes de la seua significació i de les teories que la sustenten.(CE20). Relacionar teoria i experimentació.(CE22). Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.(CE23). Comprendre els aspectes qualitius i quantitius dels problemes químics.(CE24). Relacionar la química amb altres



	disciplines.(CE26).
COMPETÈNCIES GENERALS	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
	Competències de l'assignatura Química Analítica III que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Capacitat per a aplicar coneixement pràctic per a la resolució de problemes relacionats amb informació qualitativa i quantitativa.	Resoldre problemes de forma efectiva.(CG4). Resoldre problemes qualitius i quantitius segons models desenvolupats prèviament.(CE14). Relacionar teoria i experimentació.(CE22). Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.(CE23). Comprendre els aspectes qualitius i quantitius dels problemes químics.(CE24).
Competències de gestió de la informació, en relació a fonts primàries i secundàries, incloent recuperació d'informació a través de cerques on-line.	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.(CG6). Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda(CT2).
Compromís ètic amb el Codi Europeu de conducta:	Adquirir una sensibilitat permanent per la qualitat i el medi ambient, el desenvolupament sostenible i la prevenció de riscos laborals.(CG10). Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com professional.(CG7).



	Que els estudiants tinguen la capacitat d'aplegar 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.(CB3).
--	---

http://ec.europa.eu/research/participants/data/ref/h2020/other/hi/h2020-ethics_code-of-conduct_en.pdf

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.
- Demostrar una conducta ètica i responsable en l'exercici del seu treball professional, valors que són transmesos pels docents i investigadors de la Universitat, com a generadora i transmissora del coneixement científic.

En relació amb els Objectius de Desenvolupament Sostenible (ODS) en aquesta assignatura s'espera que els/les estudiants/es siguin capaços 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/o 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. Introducció als mètodes electroanalítics

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. Eluïó a temperatura programada. Identificació en cromatografia de gasos.

7. Cromatografia de líquids alta 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 estacionària (I): control de la força d'eluïó. Selecció de les fases mòbil i estacionària (II): control de la selectivitat. Eluïó 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/llició 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 eventuais 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 aprengui 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 pugui treballar-hi a casa, i resoldre posteriorment els possibles dubtes.



Seminaris-Conferències:

Els Seminari-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. Les activitats dels estudiants no són recuperables. Els estudiants poden sol·licitar per escrit ser avaluats només mitjançant l'examen.

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

