

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

Codi	44603
Nom	Química analítica avançada
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2218 - M.U. en Química	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2218 - M.U. en Química	1 - Química avançada	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
RUIZ ANGEL, MARIA JOSE	310 - Química Analítica

RESUM

L'assignatura *Química Analítica Avançada* forma part de la matèria de *Química Avançada* i té per objectiu ampliar i complementar els coneixements de Química Analítica adquirits en el grau. En concret, l'assignatura aprofundeix en el coneixement de les etapes de preparació i tractament de mostres dins el procés analític, introduint els sistemes assistits i les tècniques de microextracció. Dins les tècniques analítiques de separació es presenten les que es basen en l'electroforesi i tècniques afins, i es considera la hibridació de sistemes cromatogràfics. L'espectrometria vibracional, l'espectrometria de plasma acoblat per inducció i la fluorescència de raigs X complementen els coneixements previs dels estudiants sobre l'ús de l'espectroscòpia en Química Analítica. Les característiques i l'ús dels sensors químics, a més dels aspectes relacionats amb la seua miniaturització, constituïran bàsicament els coneixements addicionals sobre electroanàlisi de l'assignatura. Finalment, es continuarà amb l'ús de la Quimiometria en Química Analítica, centrant els continguts en l'anàlisi exploratori de les dades a través de l'anàlisi discriminant lineal i de l'anàlisi de components principals, per acabar amb l'ús de la regressió multivariant mitjançant mínims quadrats parcials.



No solament es consideraran els aspectes teòrics i metodològics de les diferents tècniques, sinó que es donarà una importància especial a tot el que es relaciona amb les aplicacions d'aquestes, perquè l'estudiant adquireixca una visió al més pràctica i funcional a través dels coneixements transmesos.

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 de química que s'imparteixen en les titulacions que sindiquen en el perfil d'ingrés que es recomana per a l'estudiant de màster.

COMPETÈNCIES

2218 - M.U. en Química

- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants siguen capaços d'integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
- Que els estudiants sàpiguen comunicar les conclusions (i els coneixements i les raons últimes que les sustenten) a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.
- Ser capaç de resoldre problemes complexos de química, siga en l'àmbit acadèmic, de la investigació o de l'aplicació industrial a nivell d'especialització o màster
- Fomentar, en contextos acadèmics i professionals de l'àmbit de la política econòmica, l'avanç tecnològic, social o cultural dins d'una societat basada en el coneixement i en el respecte a: a) els drets fonamentals i d'igualtat d'oportunitats entre hòmens i dones, b) els principis d'igualtat d'oportunitats i accessibilitat universal de les persones amb discapacitat i c) els valors propis d'una cultura de pau i valors democràtic.
- Ser capaços de dissenyar, realitzar, analitzar i interpretar experiències i dades complexes en l'entorn de la química a nivell d'especialització.
- Adquirir coneixements avançats que permeten valorar la importància de la química en la salut, el medi ambient, nous materials i energia.



RESULTATS DE L'APRENTATGE

- Descriure el fonament i la metodologia de les principals tècniques de tractament de mostres i explicar l'efecte de les diferents variables experimentals sobre el resultat d'aquestes.
- Seleccionar, del conjunt de tècniques de preparació de mostres d'ús habitual, les que resulten més adequades per a la seua aplicació en la resolució d'un problema analític concret en funció de la naturalesa de la mostra, del tipus i concentració dels analits, i dels paràmetres de qualitat exigibles a l'anàlisi.
- Dissenyar procediments per al tractament de mostra atenent criteris de qualitat dels resultats, seguretat i sostenibilitat.
- Explicar el fonament de les principals tècniques analítiques avançades de separació (cromatogràfiques i afins), electroanalítiques i espectroscòpiques, i descriure la instrumentació corresponent.
- Detallar la metodologia experimental, inclosa la selecció de variables experimentals, interpretar els registres obtinguts en cadascuna de les tècniques estudiades, i descriure en cada cas les aplicacions analítiques més rellevants.
- Seleccionar i aplicar, de entre les principals tècniques quimiomètriques, la que resulte més adequada per al tractament de dades analítiques complexes, i interpretar adequadament els resultats obtinguts.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Preparació i tractament de mostres

Representativitat i mostreig. Operacions bàsiques en la preparació de mostres. Ús de sistemes assistits per a la preparació de mostres. Tècniques de microextracció. Nous desenvolupaments.

2. Tècniques analítiques de separació

Les tècniques de separació en Química Analítica. Electroforesi i tècniques afins. Hibridació de tècniques en cromatografia. Aplicacions.

3. Espectroscòpia analítica

Tècniques espectroscòpiques en Química Analítica. Espectrometria vibracional. Espectroscòpia de plasma acoblat per inducció: ICP-OES e ICP-MS. Fluorescència de raigs X. Aplicacions.



4. Electroanàlisi

Tècniques electroanalítiques. Sensors electroquímics: generalitats, sensibilitat i especificitat. Electroanàlisi i miniaturització. Aplicacions.

5. Quimiometria

Quimiometria en Química Analítica. Anàlisi exploratòria de dades: PCA i LDA. Estudi de casos pràctics de PCA i LDA. Regressió multivariant: mínims quadrats parcials (PLS). Estudi de casos pràctics.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	35,00	100
Tutories reglades	5,00	100
Seminaris	5,00	100
Pràctiques en aula informàtica	5,00	100
Estudi i treball autònom	75,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGIA DOCENT

L'assignatura s'imparteix a través de lliçons magistrals participatives, seminaris on es duen a terme, entre altres activitats formatives, problemes pràctics aplicats, i classes tutoritzades orientades a avaluar la comprensió de l'assignatura per part de l'alumne. A més fa ús de la plataforma aula virtual per a comunicació i intercanvi d'informació, i s'empren els recursos de l'aula d'informàtica per a les pràctiques de Quimiometria.

AVALUACIÓ

Primera convocatòria

La qualificació de l'assignatura en primera convocatòria s'obté de les qualificacions obtingudes de l'examen final i les activitats d'avaluació contínua realitzades al llarg del curs. Examen i activitats d'avaluació contínua es mitjanaran d'acord amb els percentatges següents:

- (a) Examen final: 70%.
- (b) Activitats d'avaluació contínua: 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 serà de 5.0.

Segona convocatòria

La qualificació de l'assignatura en segona convocatòria s'obtindrà aplicant els mateixos criteris que en la primera convocatòria.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- Cámara C. (ed.), Fernández P., Martín Esteban A., Pérez-Conde C. i Vidal M. Toma y tratamiento de muestras. Editorial Síntesis, Madrid, 2002
- A. Ríos Castro, M. C. Moreno Bondi, B. M. Simonet Suau (coords.) Técnicas espectroscópicas en química analítica (vol. I y II). Editorial Síntesis, Madrid, 2012
- SKOOG D. A., HOLLER F. J., NIEMAN T. A. Principios de Análisis Instrumental, 5a edició, McGrawHill, Madrid, 2001
- Miller J. C. i J. N. Miller Estadística y Quimiometría para Química Analítica. Pearson Education S. A., Madrid, 2002

Complementàries

- Mitra (ed) S. Sample preparation techniques in analytical chemistry. John Wiley and Sons. New Jersey, 2003
- Dean. J. R. Methods for environmental trace analysis. John Wiley and Sons. Chichester, 2003
- Luque de Castro M. D. i Luque García J. L. Acceleration and automation of solid sample treatment. Elsevier, Amsterdam, 2002
- Aballe, M.; López Ruiz, J.; Badía, J. M.; Adeva, P. (eds.) Microscopía Electrónica de Barrido y Microanálisis por Rayos X, CSIC i ed. Rueda, Madrid, 1996
- Bonnel, D. A. (ed.) Scanning Probe Microscopy and Spectroscopy: Theory, Techniques and Applications. 2a ed., Wiley, Nueva York, 2001
- Doménech, A.; Doménech, M. T.; Costa, V. Electrochemical methods for archaeometry, conservation and restoration. Springer, Berlin, 2009
- Doménech, A. Electrochemistry of Porous Materials. Taylor & Francis, Boca Raton, 2010



- Goldstein, J. L.; Newbury, D. E.; Echlin, P.; Joy, D. C.; Fioril, Ch.; Lifshin, E. Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis. Plenum Press, Nueva York, 1984
- TAYLOR H.E. Inductively Coupled Plasma-Mass Spectrometry. Practices and Techniques. Academic Press, San Diego, 2001
- MONTASER A. Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry. Wiley-VCH, New York, 1997
- Massart D. L., B. G. M. Vandeginste, L. M. C. Buydens, S. De Jong, P. J. Lewi i J. Smeyers-Verbeke, Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: part A i B, Elsevier, Amsterdam, 1997
- Sagrado S., E. Bonet, M. J. Medina i Y. Martín. Manual Práctico de Calidad en los Laboratorios. Enfoque ISO 17025. AENOR 2005