

Mètodes Espectroscòpics d'Anàlisi**2012/2013**

Codi: 102488

Crèdits ECTS: 6

Titulació	Pla	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Graduat en Química	953 Graduat en Química	OB	3	1

Professor de contacte

Nom: Julián Alonso Chamarro

Correu electrònic: Julian.Alonso@uab.cat

Utilització d'idiomes

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Algun grup íntegre en anglès: No

Algun grup íntegre en català: Sí

Algun grup íntegre en espanyol: Sí

Prerequisits

Cal tenir aprovada l'assignatura *Fonaments de Química*. Es recomanable haber adquirit els coneixements i competències impartits a l'assignatura *Química Analítica i Electroanàlisi*.

Objectius

L'assignatura pretén complementar els coneixements bàsics dels alumnes en l'àmbit de la Química Analítica ampliant el conjunt de tècniques d'anàlisi instrumental, en particular els mètodes espectroscòpics d'anàlisi.

Els coneixements adquirits en aquesta assignatura són fonamentals per a poder comprendre i abordar l'aprenentatge de matèries d'altres àrees de coneixement, en base al caràcter multidisciplinari de la matèria Química Analítica.

Els objectius principals de l'assignatura són:

1. Descriure el fonament i la instrumentació associada de les principals tècniques òptiques d'anàlisi.
2. Aplicar aquests coneixements a la resolució de problemes d'anàlisi químic.

Les pràctiques de laboratori relacionades amb els continguts d'aquesta assignatura es desenvoluparan en l'assignatura *Anàlisi i Determinació de propietats*.

Competències

- Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa o qualitativa en àmbits familiars i professionals.
- Aprendre de manera autònoma.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, els principis, les teories i els fets fonamentals de les diferents àrees de la química.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer i analitzar problemes químics i plantejar respostes o treballs adequats per a resoldre'ls.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
- Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Resultats d'aprenentatge

1. Aprendre de manera autònoma.
2. Classificar els mètodes electroanalítics i òptics d'anàlisi, i el seu marc d'utilització.
3. Emprar els principis de l'electroquímica i l'espectrofotometria (òptica) per a la resolució de problemes analítics.
4. Emprar la tecnologia de la informació i la comunicació per a la documentació de casos i problemes.
5. Enunciar els principis involucrats en els mètodes electroquímics i òptics d'anàlisi.
6. Explicar el fonament de funcionament de l'equipament electroanalític i òptic.
7. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
8. Identificar els mètodes estadístics en el tractament dels resultats de les anàlisis per obtenir-ne informació de la qualitat.
9. Interpretar els resultats obtinguts en problemes analítics, així com els paràmetres de qualitat d'aquests.
10. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
11. Planificar l'estratègia a seguir en les diferents etapes del procediment analític per a la resolució dels problemes abordats.
12. Raonar de forma crítica.
13. Reconèixer les etapes del procediment analític en l'anàlisi química.
14. Resoldre problemes i prendre decisions.
15. Resoldre una col·lecció de problemes d'anàlisi instrumental.
16. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
17. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Continguts

PART I: INTRODUCCIÓ

1. Introducció a les tècniques instrumentals d'anàlisi. Aproximació als problemes que la Química Analítica ha de resoldre actualment. Definició de instrument. Característiques bàsiques dels instruments. Propietats analítiques. Anàlisi quantitativa: Calibratge.

2. Introducció als mètodes òptics d'anàlisi. Propietats de la llum. Principis de interacció radiació-materia: reflexió, dispersió, refracció, difracció, polarització. L'espectre electromagnètic. Absorció i emissió d'energia per àtoms i molècules. Classificació de les tècniques òptiques d'anàlisi. Tècniques moleculars i atòmiques. Tècniques d'absorció i d'emissió.

PART II: ESPECTROSCÒPIA MOLECULAR

3. Espectrofotometria d'absorció molecular UV- visible. Fonament de la tècnica. Transmittància i absorbància. Deducció Llei de Lambert- Beer. Limitacions de llei. Components bàsics de la instrumentació analítica. Fonts de radiació. Selecció de la longitud d'ona. Detectores. Espectrofotòmetres de feix senzill, doble feix i de díodes en línia. Aplicacions a l'anàlisi quantitativa. Valoracions fotomètriques. Resolució de mescles. Espectroscòpia de derivades.

4. Espectrofotometria d'absorció molecular IR. Fonaments: espectres vibració. Components bàsics de la instrumentació analítica. Espectroscòpia IR amb transformada de Fourier (FTIR). Preparació de la mostra. Anàlisi qualitativa. Anàlisi quantitativa: Anàlisi de Gases. NIR.

5. Luminescència molecular. Fonaments de la luminescència: Fluorimetria i fosforimetria. Espectres d'excitació i d'emissió. Variables que afecten a la luminescència. Relacions quantitatives. Tècniques de *quenching*: Llei Stern-Volmer. Instrumentació. Quimioluminescència. Aplicacions: FRET i marcadors fluorescents.

PART III: ESPECTROSCOPIA ATÒMICA

6. Espectroscòpia d'absorció atòmica. Fonament de l'absorció atòmica. Espectres atòmics. Atomització:

efecte de la temperatura. Instrumentació. Espectroscòpia d'absorció atòmica de flama. Radiació de fons. Espectroscòpia d'absorció atòmica amb fons de grafit. Generació d'hidrurs i vapor fred. Correcció del senyal de fons. Interferències espectrals y químiques. Aplicacions al anàlisi quantitativa.

7. Tècniques d'emissió atòmica. Fonaments de l'emissió atòmica. Sistemes de atomització: flama i plasma. Instrumentació. Fotometria de flama. Espectroscòpia de plasma acoblat per inducció (ICP): Fonaments. Instrumentació seqüencial y multicanal. Interferències espectrals i químiques. Aplicacions.

PART IV: ALTRES TÈCNIQUES ANALÍTIQUES

8. Espectrometria de masses. Fonaments. Característiques del espectre de masses. Espectròmetres de masses. Sistemes de introducció de la mostra. Fons d'ions: Plasma d'acoblament inductiu, impacte electrònic, ionització química, ionització i desorció per camp. Maldi i electrospray. Analitzadors de masses: quadrupol de temps de vol, sector magnètic y doble enfocament. Detectors. Aplicacions qualitatives i quantitatives. Espectrometria de masses atòmica. Sistemes de ionització: plasma de acoblament inductiu. Característiques y aplicacions. Espectrometria de masses molecular. Fons de ionització: impacte de electrons, ionització química, electrospray i MALDI. Aplicacions qualitatives i quantitatives. Sistemes Híbrids y tàndem.

9. Mètodes de raigs X. Fonaments teòrics. Producció i espectres de raigs X. Instrumentació. Fluorescència de raigs X. Aplicacions: Laboratori de llum sincrotró.

Metodologia

Classes de teoria i seminaris:

Es combinarà el model expositiu (llicon magistral), amb suport audiovisual, i activitats formatives que es podran realitzar en grup o individualment. En les llicons magistrals, el professor oferirà una visió global del tema tractat, incidirà en aquells conceptes clau per a la comprensió i respondrà a les eventuals dubtes o qüestions. Per afavorir la consecució dels objectius d'aprenentatge plantejats s'introduiran activitats formatives encaminades a afavorir l'aprenentatge cooperatiu i la participació dels estudiants. Per a l'estudi individual i la preparació dels temes en profunditat, s'indicarà una bibliografia bàsica i complementària. Les activitats estan concebudes per adquirir les competències específiques així com per desenvolupar les competències transversals.

Al llarg del quadrimestre es realitzaran també diferents seminaris dedicats la presentació de treballs sobre aplicacions seleccionades de les tècniques instrumentals estudiades. Amb aquests seminaris es pretén aprofundir sobre aspectes tractats en les classes de teoria. Els treballs s'elaboraran en grup i s'exposaran de forma oral al conjunt de la classe.

Classes de problemes

S'aplicaran els coneixements adquirits en les classes de teoria mitjançant la resolució de qüestions i problemes. Es desenvoluparan seguint dues estratègies diferents: (a) El professor resoldrà davant tot el grup alguns problemes seleccionats o problemes-tipus gràcies als quals l'alumne aprengui a identificar els elements essencials del plantejament i com abordar la resolució i b) Els estudiants, en petits grups, guiats i ajudats pel professor, s'enfrontessin a problemes i qüestions anàlogues o nous plantejaments.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	10	0,4	1, 3, 4, 8, 9, 11, 12, 14, 15, 16
Classes de teoria i seminaris	37	1,48	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 10, 11, 12, 13, 16, 17

Tipus: Supervisades			
Tutories	5	0,2	3, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15, 16
Tipus: Autònomes			
Estudi	52	2,08	1, 2, 4, 5, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 16, 17
Resolució de problemes i preparació de seminaris	40	1,6	1, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17

Avaluació

Les competències d'aquesta assignatura seran avaluades mitjançant:

a) Un control dels temes inicials (individual), amb un pes del 20% de la nota final.

b) Un control de tota la matèria (individual), amb un pes del 50% en la nota final.

c) Activitats cooperatives i col·laboratives realitzades dins i fora de l'aula, respectivament (en grup). Tindran un pes del 30% en la nota final.

Es considerarà un "no presentat" en l'assignatura si l'alumne no es presenta a cap dels dos controls, independentment de si ha fet o no les activitats cooperatives i/o col·laboratives.

Per aprovar l'assignatura es demana un mínim de 5 punts (sobre 10) en la mitjana dels controls i les activitats cooperatives i col·laboratives.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Activitats formatives i Seminaris	30	0	0	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17
Parcial 1	20	2	0,08	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17
Parcial 2	50	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17

Bibliografia

F. James Holler, Douglas A Skoog, Stanley R. Crouch. *Principios de Analisis Instrumental*. 6.^a Edición. 2008. ISBN-10: 9706868291. ISBN-13: 9789706868299.

Douglas A. Skoog, Donald M. West, F. James Holler, Stanley R. Crouch. *Fundamentos de Quimica Analítica*. Ed. Paraninfo. 8^a Edición. 2011. ISBN: 9788497323338.

Skoog, D.A., Leary, J.J.; *Análisis Instrumental*, 4^a ed. McGraw Hill, Madrid, 1994.

Kellner, R., Mermet, M., Otto, M., Widmer, H.M. (Eds.); *Analytical Chemistry*. Wiley-VCH, Weinheim, 1998.