

**Anàlisi i Determinació de Propietats**

Codi: 102533

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	3	2

**Professor/a de contacte**

Nom: Santiago MasPOCH Andrés

Correu electrònic: Santiago.Maspoch@uab.cat

**Utilització d'idiomes a l'assignatura**

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: Sí

Grup íntegre en espanyol: No

**Prerequisits**

Haver cursat o estar matriculat de Química Física, Mètodes espectroscòpics d'anàlisi i Tècniques de separació. Haver superat el test de seguretat (campus virtual)

Durant les practiques, els alumnes han de dur posada la bata de laboratori i ulleres de seguretat homologades. A més dels estris habituals per escriure han de portar una calculadora científica, una llibreta de laboratori i una espàtula.

**Objectius**

L'objectiu final de l'assignatura és que l'alumne assoleixi les competències que s'indiquen en el apartat corresponent.

Els objectius generals son:

1. Aplicar les lleis fonamentals i els principis teòrics adquirits per l'alumne en els cursos de les assignatures anomenades en els prerequisits.
2. Familiaritzar l'alumne amb l' utilització d'instrumentació específica, l' adquisició de dades en el laboratori i la seva interpretació, l' introducció en els mètodes d'anàlisi de dades...
3. Desenvolupar en l' alumne una mentalitat crítica pel que fa referència al nivell de confiança de les seves mesures, realització de càlculs i la interpretació de resultats.

**Competències**

- "Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques; identificar-ne el significat i relacionar les dades amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades."
- Adaptar-se a noves situacions.
- Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa o qualitativa en àmbits familiars i professionals.
- Aprendre de manera autònoma.

- Avaluar els riscos sanitaris i l'impacte ambiental i socioeconòmic associat a les substàncies químiques i a la indústria química.
- Comunicar-se amb claredat en anglès.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
- Demostrar motivació per la qualitat.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, els principis, les teories i els fets fonamentals de les diferents àrees de la química.
- Desenvolupar treballs de síntesi i anàlisis de tipus químic a partir de procediments establerts prèviament.
- Emprar correctament la llengua anglesa en l'àmbit de la química.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
- Manejar instruments i material estàndard en laboratoris químics d'anàlisi i síntesi.
- Manipular amb seguretat els productes químics.
- Mantenir un compromís ètic.
- Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
- Operar amb un cert grau d'autonomia i integrar-se en poc temps en l'ambient de treball.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer i analitzar problemes químics i plantejar respostes o treballs adequats per a resoldre'ls.
- Tenir destresa per al càlcul numèric.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
- Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

## Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Aplicar els continguts teòrics adquirits a l'explicació de fenòmens experimentals.
3. Aplicar els mètodes de calibratge adequats en cada cas estudiat.
4. Aplicar mètodes estadístics de tractament de dades.
5. Aprendre de manera autònoma.
6. Avaluar els resultats experimentals de manera crítica i deduir-ne el significat.
7. Comunicar-se al laboratori en anglès.
8. Comunicar-se amb claredat en anglès.
9. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
10. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
11. Demostrar motivació per la qualitat.
12. Descriure la normativa de seguretat bàsica.
13. Desenvolupar hàbits i habilitats pròpies del laboratori.
14. Disposar amb seguretat dels residus de les reaccions químiques.
15. Dissenyar experiments senzills per a l'estudi de sistemes químicofísics simples.
16. Distingir el rebuig dels reactius i productes químics de forma selectiva.
17. Distingir l'etiquetatge de reactius químics en anglès.
18. Efectuar avaluacions correctes dels riscos sanitaris i de l'impacte ambiental de camps magnètics.
19. Escriure informes de laboratori simples en anglès
20. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
21. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
22. Identificar els principals reactius del laboratori i la seva presentació comercial.
23. Identificar els riscos de reactius de síntesi.
24. Interpretar les dades de processos de separació cromatogràfics obtingudes mitjançant l'ús d'eines informàtiques (programes de simulació).
25. Interpretar les dades experimentals de processos de separació obtinguts al laboratori.
26. Interpretar les dades procedents d'observacions i mesures al laboratori en termes de la seva significació i de les teories que la sustenten.
27. Interpretar les fitxes de seguretat dels productes químics.
28. Manejar els instruments i materials utilitzats en diferents tècniques de separació.
29. Manejar els termes químics més habituals en anglès.

30. Manejar instruments i material de laboratori per a la determinació de propietats químicofísiques i l'anàlisi de productes i reactius.
31. Manejar instruments i material estàndard en laboratoris químics d'anàlisi i síntesi en l'àmbit de la química orgànica.
32. Manejar instruments per al registre dels diferents tipus d'espectres.
33. Manipular amb seguretat els circuits elèctrics que formen part dels diferents espectròmetres.
34. Manipular amb seguretat les diferents radiacions involucrades en cada tècnica espectroscòpica.
35. Manipular amb seguretat reactius inflamables, tòxics i/o corrosius.
36. Manipular els principals reactius i dissolvents al laboratori químic.
37. Mantenir un compromís ètic.
38. Memoritzar els termes científics utilitzats en llengua anglesa dins de l'àmbit de la química / química física experimental.
39. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
40. Observar al laboratori la reactivitat i el comportament de compostos representatius.
41. Observar les propietats físiques i químiques de diferents substàncies.
42. Operar amb un cert grau d'autonomia i integrar-se en poc temps en l'ambient de treball.
43. Proposar idees i solucions creatives.
44. Raonar de forma crítica.
45. Realitzar tests estàndard sobre els quals basar els resultats obtinguts.
46. Realitzar un treball de síntesi, anàlisi i determinació de propietats químiques i físiques a partir de les instruccions subministrades en un procediment detallat.
47. Reconèixer alguns dels diferents equips instrumentals utilitzats en els mètodes espectrofotomètrics i cromatogràfics d'anàlisi.
48. Reconèixer els reactius i dissolvents potencialment perillosos.
49. Reconèixer i interpretar les etapes del procediment analític.
50. Reconèixer l'ús de cada reactiu al laboratori i prendre les precaucions de seguretat oportunes en cada cas (ulleres i/o guants especials, campana extractora, màscara de gasos, etc.).
51. Reconèixer riscos potencials al laboratori abans que es produeixin.
52. Redactar un quadern de laboratori que reculli la descripció dels procediments desenvolupats, les observacions realitzades, els resultats obtinguts, la interpretació d'aquests i les conclusions.
53. Relacionar el resultat obtingut amb la informació original, incloent-hi la interpretació correcta dels errors associats al valor obtingut.
54. Relacionar els coneixements adquirits amb l'ús de les tècniques analítiques corresponents al laboratori.
55. Relacionar els principis, les teories i els fets fonamentals de la química amb les dades experimentals obtingudes al laboratori durant l'estudi de diferents sistemes químics físics.
56. Relacionar les característiques dels compostos amb les seves propietats físiques i químiques elementals.
57. Relacionar les dades experimentals amb les propietats fisicoquímiques i/o anàlisi dels sistemes objecte d'estudi.
58. Resoldre problemes qualitius i/o quantitius segons uns models prèviament desenvolupats.
59. Seguir els procediments de seguretat al laboratori químic.
60. Seguir procediments estàndard de laboratori.
61. Seguir procediments estàndards de laboratori descrits en anglès.
62. Tenir destresa per al càlcul numèric.
63. Treballar al laboratori amb seguretat i seguint el procediment adequat.
64. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
65. Utilitzar aparells d'espectroscòpia per confirmar els resultats experimentals.
66. Utilitzar correctament les eines informàtiques necessàries per calcular, representar gràficament i interpretar les dades obtingudes, així com la seva qualitat.
67. Utilitzar el material bàsic d'un laboratori químic.
68. Utilitzar els mètodes estadístics per al tractament dels resultats de les anàlisis i obtenir-ne informació de qualitat.
69. Utilitzar instruments i material estàndard en laboratoris químics d'anàlisi i síntesi en l'àmbit de la química inorgànica.
70. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.
71. Utilitzar les estratègies adequades per a l'eliminació segura dels reactius.
72. Utilitzar les instal·lacions de seguretat de forma adequada.
73. Utilitzar programes de disseny gràfic per dibuixar fórmules químiques i les seves reaccions.

74. Utilitzar programes de tractament de dades per elaborar informes.
75. Valorar els riscos en l'ús de substàncies químiques i procediments de laboratori.
76. Valorar les influències de paràmetres variables en el mesurament, com ara concentració, temperatura, pressió, dissolvents, etc.

## Continguts

Es començarà per impartir quatre hores de classes magistrals (dues sessions de 2 hores cadascuna), en què s'explicarà els continguts i la metodologia utilitzada per a la realització dels quatre blocs en què es divideixen els continguts d'aquesta assignatura. Aquests quatre blocs es reparteixen en 24 sessions de 4 hores cadascuna, tal com s'indica a continuació.

### MÈTODES ESPECTROSCÒPICS (5/6 dies)

- AAS (Espectroscòpia d'absorció atòmica). Determinació de Cu en begudes alcohòliques
- AAS ( Espectroscòpia d'emissió atòmica) . Determinació de K en aigua)
- Espectrofotometria UV-Visible, . Determinació de Fe(II) en un complex vitamínic
- Espectrofotometria UV-Visible. Multicomponents. Determinació simultània de Co i Ni per formació d'un complex colorejat amb PAR
- Espectrofotometria UV-Visible. Determinació del pKa d'un indicador sintètic (1 dia) / Opcional: Determinació del pKa d'un indicador natural

### MÈTODES CROMATOGRÀFICS (5/6 dies)

- Cromatografia de líquids. Determinació de cafeïna en begudes de cafè i/o cola mitjançant HPLC-UV-Vis
- Cromatografia de líquids. Identificació de sulfonamides en medicament d'ús veterinari mitjançant HPLC-UV-Vis
- Cromatografia de gasos. Separació e identificació de mesclures d'alcohols per GC-FID i/o GC-TCD
- Cromatografia de gasos. Determinació quantitativa de THM d'aigua de piscina (SAF) mitjançant HS-GC-ECD (SAQ)
- Cromatografia de líquids. Simulació de una separació per HPLC.
- Determinación MeOH en aiguardent

### CINÈTICA (8 dies)

- Cinètica per polarimetria. Reacció d'inversió de la sacarosa.
- Cinètica per conductimetria. Hidròlisi bàsica de l'acetat d'etil
- Iodació de la ciclohexanona en medi àcid: estudi cinètic.
- Estudi de l'efecte de la força iònica sobre la velocitat de la reacció d'oxidació del iodur amb l'anió peroxodisulfat.
- Solvatocromisme com a eina per caracteritzar les propietats d'un dissolvent

### QUÍMICA DE SUPERFÍCIES I ELECTROQUÍMICA (4 dies)

- Isoterma d'adsorció
- Conductivitat de dissolucions iòniques

- Determinació de la concentració micel·lar crítica mitjançant mesures de conductivitat.
- Depuració d'aigües residuals mitjançant processos electroquímics
- Tensió superficial. Mullabilitat

## Metodologia

Aquesta assignatura consta de 4 blocs distribuïts d'acord a la metodologia i als coneixements teòrics emprats. Abans de començar les sessions de laboratori hi haurà dues sessions a l'aula de teoria sobre les normes que apareixen en aquesta Guia Docent, les informacions d'última hora i la metodologia i continguts dels blocs.

L'assistència a l'aula i al laboratori és obligatòria. Una falta no justificada implica un zero de la pràctica. Els alumnes, en grups de 2 estudiants, realitzaran 24 sessions de laboratori d'una duració de 4 hores, durant les quals es faran unes 19-20 pràctiques diferents. Els estudiants disposaran prèviament dels guions de les pràctiques per la seva preparació. Han d'entrar al laboratori amb el guió de la pràctica llegit i amb el càlculs que demana la preparació de dissolucions plantejats des de casa

Cal escriure de forma correcta a la llibreta de laboratori on s'anotaran tots els resultats experimentals i les explicacions del professor. Un cop acabada la pràctica, i endreçat el material, els alumnes omplen i/o redacten l'informe de la pràctica (introducció i objectius, resultats i discussió, conclusions, bibliografia i un annex on es mostrin les expressions emprades per a l'avaluació de les incerteses). S'han de presentar tots els resultats obtinguts al laboratori en taules amb les incerteses i les unitats corresponents. Els gràfics cal presentar-los amb un títol, les magnituds representades, les unitats corresponents, les barres d'incerteses i els resultats dels ajusts si escau

En alguns casos, els alumnes s'enduran l'informe a casa per poder fer els càlculs amb més temps

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes magistrals	4	0,16	12, 55, 71
Pràctiques de laboratori	96	3,84	1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 67, 68, 69, 71, 72, 74, 75, 76
Tipus: Autònomes			
Lectura i estudi dels guions, preparació de las pràctiques al laboratori i realització d'informes, si s'escau.	44	1,76	2, 5, 6, 15, 19, 21, 24, 25, 26, 29, 38, 44, 53, 57, 66, 70

## Avaluació

El procés d'avaluació segueix el principi d'avaluació continuada. La nota global estarà constituïda per la suma ponderada de 3 apartats: laboratori de QF (30%); laboratori de QA (30%) i examen escrit (40%)

La nota de laboratori estarà constituïda fonamentalment per la qualificació dels informes, però pot incloure, amb diferents ponderacions, altres conceptes com: proves de prelab (curt test escrit on se intenta verificar que l'alumne a preparat adequadament la pràctica que va a realitzar a continuació); llibreta de laboratori; comportament i actitud. En la presentació del laboratori s'explicitaran als conceptes que se avaluaran i els

corresponents factors de ponderació. Si d'un laboratori s'obté una qualificació < 3,5, l'assignatura es considerarà suspesa i en l'acta constarà la nota del laboratori suspès.

El examen escrit constarà de dos parts, cadascuna corresponen a un dels dos laboratoris. La nota de l'examen escrit serà la mitjana de la nota de les dues parts. Per fer la mitjana cal treure una nota igual o superior a 4,0; si en una (o les dos parts) no s'obté la nota mínima de 4,0, es disposarà d'un examen de recuperació. Si en la recuperació no s'arriba al 4,0 l'assignatura es considerarà suspesa i en l'acta constarà la nota de l'examen suspès.

Per participar a la recuperació, l'alumnat ha d'haver estat prèviament avaluat en un conjunt d'activitats el pes de les quals equivalgui a un mínim de dues terceres parts de la qualificació total de l'assignatura i haver obtingut una qualificació global igual o superior a 3.5

En el cas de incompliment de les normes de seguretat, un estudiant podrà ser expulsat del laboratori i suspendre la pràctica d'aquell dia. En el cas de incompliment greu oreiteratiu de les normes de seguretat podrà ser expulsatdel laboratori i suspendre la assignatura.

## Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Examen escrit	40%	6	0,24	2, 4, 6, 12, 25, 26, 27, 29, 38, 44, 49, 53, 54, 55, 57, 58, 62, 68
Presentació de resultats	30%	0	0	1, 2, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 15, 19, 21, 24, 25, 26, 29, 43, 44, 45, 49, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 62, 66, 68, 70, 73, 74, 76
Resultats de la pràctica	20%	0	0	11, 13, 15, 21, 24, 25, 28, 30, 31, 32, 40, 41, 42, 44, 45, 46, 52, 53, 57, 58, 60, 62, 67, 69, 76
Treball personal	10%	0	0	1, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 50, 51, 52, 53, 56, 57, 59, 60, 61, 63, 64, 65, 67, 69, 71, 72, 75, 76

## Bibliografia

P.W. ATKINS.; J. DE PAULA,

*Atkins' Physical Chemistry.*

9ª ed. Oxford University Press, 2009.

(Traducció espanyola de la 8ª ed., Ed. Panamericana, 2008)

J. Guiteras, R. Rubio, G. Fonrodona,

*Curso experimental de Química Analítica.*

Ed. Síntesis 2003

D.A. Skoog, F.J.Holler, T.A. Nieman,

*Principios de Análisis Instrumental,*

5ª ed Mc Graw Hil, 2001

D.C.Harris, C.A. Lucy

Quantitative Chemical Analysis, 9th ed.

Mac Millan Education, 2016

J.N. Miller, J.C. Miller Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry 6th ed.

Pearson2010

Els guions de pràctiques contenen informació bibliogràfica per cada una de les pràctiques.