

**Laboratori d'Anàlisi Cromatogràfica i
Espectroscòpica**

Codi: 105044
Crèdits: 3

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	3	2

La metodologia docent i l'avaluació proposades a la guia poden experimentar alguna modificació en funció de les restriccions a la presencialitat que imposin les autoritats sanitàries.

Professor/a de contacte

Nom: Jordi Coello Bonilla
Correu electrònic: Jordi.Coello@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

Equip docent

Julián Alonso Chamarro
Manuel Valiente Malmagro

Prerequisits

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

Durant les pràctiques, 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'anàlisis 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.
- Avaluar els riscos sanitaris i l'impacte ambiental i socioeconòmic associat a les substàncies químiques i a la indústria química.
- 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 anàlisi 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.
- Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
- 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.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- 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. Avaluar els resultats experimentals de manera crítica i deduir-ne el significat.
6. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
7. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
8. Demostrar motivació per la qualitat.
9. Descriure la normativa de seguretat bàsica.
10. Desenvolupar hàbits i habilitats pròpies del laboratori.
11. Distingir el rebuig dels reactius i productes químics de forma selectiva.
12. Distingir l'etiquetatge de reactius químics en anglès.
13. Efectuar avaluacions correctes dels riscos sanitaris i de l'impacte ambiental de camps magnètics.
14. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
15. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
16. Identificar els principals reactius del laboratori i la seva presentació comercial.
17. Interpretar les dades de processos de separació cromatogràfics obtingudes mitjançant l'ús d'eines informàtiques (programes de simulació).
18. Interpretar les dades experimentals de processos de separació obtinguts al laboratori.
19. Interpretar les dades obtingudes en les mesures experimentals per expressar una estructura química.
20. Interpretar les dades procedents d'observacions i mesures al laboratori en termes de la seva significació i de les teories que la sustenten.
21. Interpretar les fitxes de seguretat dels productes químics.

22. Manejar els instruments i materials utilitzats en diferents tècniques de separació.
23. Manejar els termes químics més habituals en anglès.
24. Manejar instruments i material de laboratori per a la determinació de propietats químicofísiques i l'anàlisi de productes i reactius.
25. Manejar instruments per al registre dels diferents tipus d'espectres.
26. Manipular amb seguretat els circuits elèctrics que formen part dels diferents espectròmetres.
27. Manipular amb seguretat les diferents radiacions involucrades en cada tècnica espectroscòpica.
28. Manipular amb seguretat reactius inflamables, tòxics i/o corrosius.
29. Manipular els principals reactius i dissolvents al laboratori químic.
30. Mantenir un compromís ètic.
31. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
32. Observar les propietats físiques i químiques de diferents substàncies.
33. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
34. Operar amb un cert grau d'autonomia i integrar-se en poc temps en l'ambient de treball.
35. Proposar idees i solucions creatives.
36. Raonar de forma crítica.
37. Realitzar un treball de síntesi, anàlisi i determinació de propietats químiques i físiques a partir de les instruccions subministrades en un procediment detallat.
38. Reconèixer alguns dels diferents equips instrumentals utilitzats en els mètodes espectrofotomètrics i cromatogràfics d'anàlisi.
39. Reconèixer els reactius i dissolvents potencialment perillosos.
40. Reconèixer i interpretar les etapes del procediment analític.
41. 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.).
42. Reconèixer riscos potencials al laboratori abans que es produeixin.
43. 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.
44. Relacionar el resultat obtingut amb la informació original, incloent-hi la interpretació correcta dels errors associats al valor obtingut.
45. Relacionar els coneixements adquirits amb l'ús de les tècniques analítiques corresponents al laboratori.
46. Relacionar les dades experimentals amb les propietats fisicoquímiques i/o anàlisi dels sistemes objecte d'estudi.
47. Resoldre problemes i prendre decisions.
48. Seguir els procediments de seguretat al laboratori químic.
49. Seguir procediments estàndard de laboratori.
50. Seguir procediments estàndards de laboratori descrits en anglès.
51. Tenir destresa per al càlcul numèric.
52. Treballar al laboratori amb seguretat i seguint el procediment adequat.
53. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
54. Utilitzar aparells d'espectroscòpia per confirmar els resultats experimentals.
55. Utilitzar correctament les eines informàtiques necessàries per calcular, representar gràficament i interpretar les dades obtingudes, així com la seva qualitat.
56. Utilitzar el material bàsic d'un laboratori químic.
57. Utilitzar els mètodes estadístics per al tractament dels resultats de les anàlisis i obtenir-ne informació de qualitat.
58. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.
59. Utilitzar les estratègies adequades per a l'eliminació segura dels reactius.
60. Utilitzar les instal·lacions de seguretat de forma adequada.
61. Utilitzar programes de tractament de dades per elaborar informes.
62. Valorar els riscos en l'ús de substàncies químiques i procediments de laboratori.
63. Valorar les influències de paràmetres variables en el mesurament, com ara concentració, temperatura, pressió, dissolvents, etc.

Continguts

Es començarà per impartir una sessió de dues hores de classe magistral, en què s'explicarà els continguts i la metodologia utilitzada per a la realització dels dos blocs en què es divideixen els continguts d'aquesta assignatura. Aquests dos blocs es reparteixen en 12 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 gasos. Separació e identificació de mescles d'alcohols per GC-FID i/o GC-TCD.
- Cromatografia de gasos. Determinació quantitativa de THM d'aigua de piscina del SAF (HS-GC-ECD).
- Cromatografia de gasos. Determinació de MeOH en aiguardent (GC-FID)
- Cromatografia de líquids. Simulació de una separació per HPLC.
- Cromatografia de líquids. Determinació de cafeïna en begudes de cafè i/o cola (HPLC-UV-Vis).
- Cromatografia de líquids. Identificació de sulfonamides en medicament d'ús veterinari (HPLC-UV-Vis).

Metodologia

Aquesta assignatura consta de 2 blocs distribuïts d'acord a la metodologia i als coneixements teòrics emprats. Abans de començar les sessions de laboratori, hi haurà una sessió 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 12 sessions de laboratori d'una duració de 4 hores, durant les quals es faran 11 pràctiques diferents. Els estudiants disposaran prèviament dels guions de les pràctiques per a 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 ompliran i/o redactaran l'informe de la pràctica (introducció i objectius, resultats i discussió, conclusions, bibliografia i un annex on es mostren 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	1	0,04	9, 42, 45
Pràctiques de laboratori	48	1,92	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 16, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 52, 53, 54, 56, 57, 59, 60, 62, 63
Tipus: Autònomes			
Lectura i estudi dels guions, preparació de les pràctiques al laboratori i realització d'informes, si s'escau.	23	0,92	2, 3, 4, 5, 6, 15, 17, 18, 19, 20, 23, 33, 36, 44, 46, 51, 55, 58, 61

Avaluació

El procés d'avaluació segueix el principi d'avaluació continuada. La nota global estarà constituïda per la suma ponderada de 2 apartats: laboratori (60%) 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 la qualificació del laboratori és < 3,5, l'assignatura es considerarà suspesa i en l'acta constarà la nota del laboratori suspès.

A l'examen escrit cal treure una nota igual o superior a 4,0 per poder fer la mitjana ponderada amb la nota de laboratori; si no s'obté la nota mínima de 4,0, es disposarà d'un examen de recuperació. Si la qualificació de la recuperació no 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 tercers parts de la qualificació total de l'assignatura i haver obtingut una qualificació global igual o superior a 3.5

Activitats d'avaluació

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

Bibliografía

P.W. ATKINS.; J. DE PAULA; *Atkins' Physical Chemistry*. 9ª ed. Oxford University Press, 2009. (Traducción 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.