

## Métodos Espectroscópicos de Análisis

Código: 102488  
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OB	3	1

La metodología docente y la evaluación propuestas en la guía pueden experimentar alguna modificación en función de las restricciones a la presencialidad que impongan las autoridades sanitarias.

### Contacto

Nombre: Julián Alonso Chamarro

Correo electrónico: Julian.Alonso@uab.cat

### Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: español (spa)

Algún grupo íntegramente en inglés: No

Algún grupo íntegramente en catalán: Sí

Algún grupo íntegramente en español: Sí

### Equipo docente

Manuel Valiente Malmagro

### Prerequisitos

Hay que tener aprobada la asignatura *Fundamentos de Química*. Es recomendable haber adquirido los conocimientos y competencias impartidos en la asignatura *Química Analítica y Electroanálisis*.

### Objetivos y contextualización

La asignatura pretende complementar los conocimientos básicos de los alumnos en las técnicas de análisis instrumental dentro de la Química Analítica y, en particular, los métodos espectroscópicos de análisis.

Los conocimientos adquiridos en esta asignatura son fundamentales para poder comprender y abordar el aprendizaje de materias de otras áreas de conocimiento, aprovechando el carácter multidisciplinar de la materia Química Analítica.

Los objetivos principales de la asignatura son:

1. Describir el fundamento y la instrumentación asociada de las principales técnicas ópticas de análisis.
2. Aplicar estos conocimientos a la resolución de problemas de análisis químico.

Las prácticas de laboratorio relacionadas con los contenidos de esta asignatura se desarrollarán en la asignatura Laboratorio de Análisis Cromatográfico y Espectroscópico.

### Competencias

- Aplicar los conocimientos químicos a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en ámbitos familiares y profesionales.
- Aprender de forma autónoma.

- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales de las diferentes áreas de la Química.
- Gestionar la organización y planificación de tareas.
- Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
- Razonar de forma crítica.
- Reconocer y analizar problemas químicos y plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
- Resolver problemas y tomar decisiones.
- Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.
- Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.

## **Resultados de aprendizaje**

1. Aprender de forma autónoma.
2. Clasificar los métodos electroanalíticos y ópticos de análisis, y su marco de utilización.
3. Emplear la tecnología de la información y la comunicación para la documentación de casos y problemas.
4. Emplear los principios de la electroquímica y la espectrofotometría (óptica) para la resolución de problemas analíticos.
5. Enunciar los principios involucrados en los métodos electroquímicos y ópticos de análisis.
6. Explicar el fundamento de funcionamiento del equipamiento electroanalítico y óptico.
7. Gestionar la organización y planificación de tareas.
8. Identificar los métodos estadísticos en el tratamiento de los resultados de los análisis para obtener información de su calidad.
9. Interpretar los resultados obtenidos en problemas analíticos así como los parámetros de calidad de los mismos.
10. Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
11. Planificar la estrategia a seguir en las diferentes etapas del procedimiento analítico para la resolución de los problemas abordados.
12. Razonar de forma crítica.
13. Reconocer las etapas del procedimiento analítico en el análisis químico.
14. Resolver problemas y tomar decisiones.
15. Resolver una colección de problemas de análisis instrumental.
16. Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.
17. Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.

## **Contenido**

### **PARTE I: INTRODUCCIÓN**

1. Introducción a las técnicas instrumentales de análisis. Aproximación a los problemas que la Química Analítica debe resolver actualmente. Definición de instrumento. Características básicas de los instrumentos. Propiedades analíticas. Análisis cuantitativo: Calibración.

2. Introducción a los métodos ópticos de análisis. Propiedades de la luz. Principios de interacción radiación-materia: reflexión, dispersión, refracción, difracción, polarización. El espectro electromagnético. Absorción y emisión de energía por átomos y moléculas. Clasificación de las técnicas ópticas de análisis. Técnicas moleculares y atómicas. Técnicas de absorción y de emisión.

### **PARTE II: ESPECTROSCOPIA MOLECULAR**

3. Espectrofotometría de absorción molecular UV-visible. Fundamento de la técnica. Transmitancia y absorbancia. Deducción Ley de Lambert- Beer. Limitaciones de ley. Componentes básicos de la instrumentación analítica. Fuentes de radiación. Selección de la longitud de onda. Detectores. Espectrofotómetros de haz sencillo, doble haz y de diodos en línea. Aplicaciones al análisis cuantitativo. Valoraciones fotométricas. Resolución de mezclas. Espectroscopia de derivadas.

4. Espectrofotometría de absorción molecular IR. Fundamentos: espectros vibración. Componentes básicos de la instrumentación analítica. Espectroscopía IR con transformada de Fourier (FTIR). Preparación de la muestra. Análisis cualitativo. Análisis cuantitativo: Análisis de Gases. NIR.

5. Luminiscencia molecular. Fundamentos de la luminiscencia: fluorímetro y fosforimetría. Espectros de excitación y de emisión. Variables que afectan a la luminiscencia. Relaciones cuantitativas. Técnicas de Amortiguación (quenching): Ley Stern-Volmer. Instrumentación. Quimioluminiscencia. Aplicaciones. FRET y marcadores fluorescentes.

### PARTE III: ESPECTROSCOPIA ATÓMICA

6. Espectroscopía de absorción atómica. Fundamento de la absorción atómica. Espectros atómicos. Atomización: efecto de la temperatura. Instrumentación. Espectroscopía de absorción atómica de llama. Radiación de fondo. Espectroscopía de absorción atómica con horno de grafito. Generación de hidruros y vapor frío. Corrección de la señal de fondo. Interferencias espectrales y químicas. Aplicaciones al análisis cuantitativo.

7. Técnicas de emisión atómica. Fundamentos de la emisión atómica. Sistemas de atomización: llama y plasma. Instrumentación. Fotometría de llama. Espectroscopía de plasma acoplado por inducción (ICP): Fundamentos. Instrumentación secuencial y multicanal. Interferencias espectrales y químicas. Aplicaciones.

### PARTE IV: OTRAS TÉCNICAS ANALÍTICAS

8. Espectrometría de masas. Fundamentos. Características del espectro de masas. Espectrómetros de masas. Sistemas de introducción de la muestra. Fuentes de iones: Plasma de acoplamiento inductivo, impacto electrónico, ionización química, ionización y desorción por campo. Maldi y electrospray. Analizadores de masas: cuádruplo, tiempo de vuelo, sector magnético y doble enfoque. Detectores. Aplicaciones cualitativas y cuantitativas. Espectrometría de masas atómica. Sistemas de ionización: plasma acoplado por inducción. Características y aplicaciones. Espectrometría de masas molecular. Fuente de ionización: impacto de electrones, ionización química, electrospray y MALDI. Aplicaciones cualitativas y cuantitativas. Sistemas híbridos y tandem.

9. Espectroscopía de rayos-X: Fundamentos y especificidad elemental. Ley de Lambert-Beer aplicada a los rayos-X: Espectroscopía de absorción (XAS). Fluorescencia de rayos-X (XRF). Aplicaciones a muestras medioambientales, agroalimentarias y al análisis clínico. Aplicaciones de radiación sincrotrón.

## Metodología

Clases de teoría y seminarios:

Se combinará el modelo expositivo (lección magistral), con apoyo audiovisual, y actividades formativas que se podrán realizar en grupo o individualmente. En las lecciones magistrales, el profesor ofrecerá una visión global del tema tratado, incidirá en aquellos conceptos clave para la comprensión y responderá a las eventuales dudas o cuestiones. Para favorecer la consecución de los objetivos de aprendizaje planteados se introducirán actividades formativas encaminadas a impulsar el aprendizaje cooperativo y la participación de los estudiantes. Para el estudio individual y la preparación de los temas en profundidad, se indicará una bibliografía básica y complementaria. Las actividades están concebidas para adquirir las competencias específicas, así como para desarrollar las competencias transversales.

A lo largo del cuatrimestre se realizarán seminarios de dos tipos:

1) dedicados a la presentación de trabajos elaborados en grupo sobre aplicaciones seleccionadas de las técnicas instrumentales estudiadas. Con estos seminarios se pretende profundizar sobre aspectos tratados en las clases de teoría. Los trabajos se expondrán de forma oral por los miembros del grupo al conjunto de la clase.

2) Seminarios impartidos por especialistas dentro del área de la instrumentación analítica estudiada en la asignatura. Estos seminarios invitados servirán no sólo para ampliar el temario de la asignatura sino también

para conocer especialistas con experiencia muy diversa y otras formas de comunicación que enriquecerán a los alumnos para su inserción laboral.

### Clases de Problemas

Se aplicarán los conocimientos adquiridos en las clases de teoría mediante la resolución de cuestiones y problemas. Se desarrollarán siguiendo dos estrategias diferentes: (a) El profesor resolverá ante todo el grupo algunos problemas seleccionados o problemas-tipo permitiendo que el alumno aprenda a identificar los elementos esenciales del planteamiento y cómo abordar su resolución y b) los estudiantes, en pequeños grupos, guiados y ayudados por el profesor, se enfrentaran a problemas y cuestiones análogas o problemas que exigen planteamientos novedosos.

Visita a una empresa de instrumentación analítica. Se visitará la empresa BioSystems dedicada a la fabricación de instrumentación analítica basada en métodos de absorción y emisión molecular para el área biomédica.

Visita a una gran instalación. Dada la temática de la asignatura, se hará una visita guiada al Sincrotrón ALBA para conocer de primera mano las posibilidades de esta gran instalación para el trabajo de especialistas químicos.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

## Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases de problemas	12	0,48	1, 4, 3, 8, 9, 11, 12, 14, 15, 16
Clases de teoría y seminarios	37	1,48	1, 2, 4, 3, 5, 6, 7, 10, 11, 12, 13, 16, 17
Tipo: Supervisadas			
Tutorías	5	0,2	4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15, 16
Tipo: Autónomas			
Estudio	49	1,96	1, 2, 3, 5, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 16, 17
Resolución de problemas y preparación de seminarios	33	1,32	1, 4, 3, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17

## Evaluación

Las competencias de esta asignatura serán evaluadas mediante:

- Un control de los temas iniciales (individual), con un peso del 20% de la nota final.
- Un control de toda la materia (individual), con un peso del 50% en la nota final.
- Actividades cooperativas y colaborativas (seminarios, problemas, evidencias, etc.) e individuales (evidencias) realizadas dentro y fuera del aula. Tendrán un peso del 30% en la nota final, sumando tanto las contribuciones cooperativas como las individuales.

Para participar en la recuperación, el alumnado debe haber sido previamente evaluado en un conjunto de actividades cuyo peso debe equivaler a un mínimo de dos terceras partes de la calificación total de la asignatura.

## Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Actividades formativas y Seminarios	30	8	0,32	1, 2, 4, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17
Examen Global	50	4	0,16	1, 2, 4, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17
Parcial 1	20	2	0,08	1, 2, 4, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17

## Bibliografía

1. F. James Holler, Douglas A Skoog, Stanley R. Crouch. Principios de Análisis Instrumental. 6.<sup>a</sup> Edición. 2008. ISBN-10: 9706868291. Cengage Learning Editores. ISBN-13: 9789706868299.
2. Skoog, Douglas A., Donald M. West, F. James Holler y Stanley R. Crouch. Fundamentos de química analítica. Novena edición. 2015. Cengage Learning Editores. ISBN: 978-607-519-937-6
3. Frame, Eileen M. Skelly; Frame, George M.; Robinson, James W. Undergraduate Instrumental Analysis. Seventh edition. 2014. CRC Press. ISBN: 9781420061352
4. Gary D. Christian, Purnendu K. Dasgupta, Kevin A. Schug. Analytical Chemistry. Seventh edition. 2013. John Wiley & Sons. ISBN: 9780470887578
5. Kellner, R., Mermett, M., Otto, M., Widmer, H.M. (Eds.); Analytical Chemistry. Wiley-VCH, Weinheim, 1998.

## Software

Microsoft Office

Acrobat Reader