

Titulació	Tipus	Curs
2502444 Química	OB	3

## Professor/a de contacte

Nom: Julian Alonso Chamarro

Correu electrònic: julian.alonso@uab.cat

## Equip docent

Iris de la Trinidad Henríquez Valido

Roberto Boada Romero

Montserrat Lopez Mesas

Ignacio Villarroya Antillac

## Idiomes dels grups

Podeu consultar aquesta informació al [final](#) del document.

## 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 Laboratori de Cromatografia i Anàlisi Espectroscòpic.

## 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. Detectors. Espectrofotòmetres de feix senzill, doble feix i de díodes en línia. Aplicacions a l'anàlisi quantitativa. Valoracions fotomètriques. Resolució de mesclades. 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: ESPECTROSCÒPIA 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.

## Activitats formatives i Metodologia

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	12	0,48	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	49	1,96	1, 2, 4, 5, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 16, 17

### Classes de teoria i seminaris:

Es combinarà el model expositiu (llició magistral), amb suport audiovisual, i activitats formatives que es podran fer en grup o individualment. A les lliçons magistrals, el professor oferirà una visió global del tema tractat, incidirà en aquells conceptes clau per a la comprensió i respondrà als eventuais dubtes o qüestions. Per afavorir l'assoliment dels objectius d'aprenentatge plantejats, s'hi introduiran activitats formatives encaminades a impulsar 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 i desenvolupar les competències transversals.

Al llarg del quadrimestre es realitzaran seminaris de dos tipus:

1) dedicats a la presentació de treballs elaborats en grup sobre aplicacions seleccionades de les tècniques instrumentals estudiades. Amb aquests seminaris es pretén aprofundir sobre aspectes tractats a les classes de teoria. Els treballs seran exposats oralment pels membres del grup al conjunt de la classe.

2) Seminaris impartits per especialistes a l'àrea de la instrumentació analítica estudiada a l'assignatura. Aquests seminaris convidats no només serviran per ampliar el temari de l'assignatura sinó també per conèixer especialistes amb experiència molt diversa i altres formes de comunicació que enriqueiran els alumnes per a la seva inserció laboral.

### Classes de Problemes

S'aplicaran els coneixements adquirits a les classes de teoria mitjançant la resolució de qüestions i problemes. Es desenvoluparan seguint dues estratègies diferents: (a) El professor resoldrà abans que res el grup alguns problemes seleccionats o problemes tipus permetent que l'alumne aprengui a identificar els elements essencials del plantejament i com abordar la seva resolució i) els estudiants, en petits grups, guiats i ajudats pel professor, s'enfrontaran a problemes i qüestions anàlogues o problemes que exigeixen nous plantejaments.

Adicionalment, i en la mesura del possible, s'intentaran fer visites a empreses fabricants d'instrumentació analítica basades en mesures òptiques i/o grans instal·lacions de recerca on s'apliquin tècniques òptiques d'anàlisi.

Nota: Dins l'horari marcat pel centre o titulació, es reservaran 15 minuts d'una classe perquè els alumnes avaluïn els professors i els cursos o mòduls mitjançant qüestionaris.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

## Avaluació

### Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Activitats formatives i Seminaris	30	8	0,32	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17
Exàmen Global	50	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17

## Avaluació Continuada

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% a la nota final.
- c) Activitats cooperatives i col·laboratives (seminaris, problemes, evidències, etc.) i individuals (evidència) realitzades dins i fora de l'aula. Tindrà un pes del 30% a la nota final, sumant tant les contribucions cooperatives com les individuals.

Per participar en la recuperació, l'alumnat ha d'haver estat avaluat prèviament en un conjunt d'activitats que el seu pes ha d'equivaler a un mínim de dues terceres parts de la qualificació total de l'assignatura.

Es considerarà que l'alumne és no avaluable quan les activitats realitzades no siguin equivalents al 51% de les que són avaluades per obtenir la qualificació total de l'assignatura.

## Avaluació Única

L'alumnat que ha seleccionat la modalitat d'avaluació única haurà de realitzar una prova final que consistirà en un examen de tot el temari de l'assignatura a realitzar el dia en què els estudiants de l'avaluació continuada realitzin l'examen del segon parcial. La qualificació final de l'estudiant serà la nota d'aquesta prova.

Si la nota final no arriba a 5, l'estudiant té una altra oportunitat de superar l'assignatura mitjançant l'examen de recuperació que se celebrarà a la data que fixa la coordinació de la titulació. La qualificació final de l'estudiant serà la nota d'aquesta prova.

S'aplicarà el mateix criteri de no avaluable que per a l'avaluació continuada.

## Bibliografia

1. F. James Holler, Douglas A. Skoog, Stanley R. Crouch. Principios de Analisis Instrumental. 6.ª 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.
6. <https://ebookcentral-proquest-com.ure.uab.cat/lib/uab/reader.action?docID=5758242> ;  
[https://bibcercador.uab.cat/permalink/34CSUC\\_UAB/1c3utr0/cdi\\_proquest\\_ebookcentral\\_EBC5758242](https://bibcercador.uab.cat/permalink/34CSUC_UAB/1c3utr0/cdi_proquest_ebookcentral_EBC5758242)

## Programari

Microsoft Office

## Llista d'idiomes

Nom	Grup	Idioma	Semestre	Torn
(PAUL) Pràctiques d'aula	1	Espanyol	primer quadrimestre	matí-mixt
(PAUL) Pràctiques d'aula	2	Català/Espanyol	primer quadrimestre	tarda
(TE) Teoria	1	Espanyol	primer quadrimestre	matí-mixt
(TE) Teoria	2	Català/Espanyol	primer quadrimestre	tarda