

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR				1/7
BAHÍA BLANCA		ARGENTINA		
DEPARTAMENTO DE: QUÍMICA				
PROGRAMA DE: PRINCIPIOS DE QUÍMICA ANALÍTICA Y QUIMIOMETRÍA				CÓDIGO:
				ÁREA NRO: III
HORAS DE CLASE				PROFESOR/A RESPONSABLE
TEÓRICAS		PRÁCTICAS		Dr. Mariano Garrido
Por semana	Por cuatrimestre	Por semana	Por cuatrimestre	
3	50	4	60	
ASIGNATURAS CORRELATIVAS PRECEDENTES				
APROBADAS		CURSADAS		
QUÍMICA INORGÁNICA BÁSICA CÁLCULO I		QUÍMICA DE LOS ELEMENTOS		
<u>DESCRIPCIÓN / OBJETIVO</u>				
<p>La asignatura PRINCIPIOS DE QUÍMICA ANALÍTICA Y QUIMIOMETRÍA pretende ser un espacio curricular en el que los estudiantes puedan aprehender conceptos y desarrollar capacidades que les permitan, al momento de egresar, conocer el rol actual de la Química Analítica como ciencia metrológica, vinculado fundamentalmente a la resolución de problemas analíticos derivados de planteos socioeconómicos o culturales que se suscitan en la entorno profesional. Asimismo, se busca que el alumno conozca, de forma general, las implicancias prácticas de las diferentes etapas involucradas en el proceso de medida químico (PMQ) para que la información obtenida sea de calidad y permita dar respuesta a los problemas analíticos planteados. En este sentido, será importante que el alumno valore las propiedades analíticas del proceso y del resultado analítico derivado de él, como indicadores de calidad que faciliten la evaluación y validación de la información obtenida.</p> <p>Asimismo, se introduce a los estudiantes en el conocimiento práctico de los métodos analíticos clásicos, basados en los diferentes equilibrios iónicos (ácido-base, de formación de complejos, redox y de precipitación) con el fin de que apliquen y dominen el uso de técnicas analíticas de rutina como valoraciones y gravimetrías.</p> <p>En la asignatura también se profundizan, particularmente, las propiedades analíticas supremas representatividad y exactitud, como base para la obtención de información relevante. Para ello, es importante que los estudiantes logren identificar claramente cuál es el problema analítico planteado y su relación con conceptos como población, muestra, variable y datos; que conozcan diferentes estrategias de muestreo (según el tipo de analito y matriz donde éste se encuentra) y que utilicen adecuadamente herramientas estadístico-lógico-matemáticas aplicadas al tratamiento de datos obtenidos (por él o por otros) que les permitan visualizarlos, explorarlos y compararlos. De esta manera, los futuros Licenciados en Química comenzarán a formar un 'criterio químico' basado en la calidad analítica y la honestidad, que los respalde a la hora de tomar decisiones o brindar un resultado en su práctica profesional.</p> <p>Según su posición en el Plan de estudios de la carrera, esta es la primera asignatura relacionada con la Química Analítica que enfrentan los estudiantes. Por esta razón será importante también comenzar a construir el léxico apropiado relacionado con la disciplina.</p> <p>El objetivo general de la asignatura PRINCIPIOS DE QUÍMICA ANALÍTICA Y QUIMIOMETRÍA apunta a: Introducir al alumno en la Química Analítica, a fin de que comience a formar un criterio (entendido como capacidad de tomar decisiones apropiadas) basado en el conocimiento de las propiedades analíticas, el proceso de medida químico, el dominio de herramientas estadístico-lógico-matemáticas, la calidad analítica y la honestidad, para dar respuestas fundamentadas a problemas de diferente índole y complejidad, planteados en el desarrollo de su vida profesional, ya sea en la industria o en el ámbito de la investigación científica.</p>				
VIGENCIA AÑOS	2022			

Esto implica:

- Conocer diferentes estrategias de muestreo, según el tipo de muestra (estado de agregación, origen, etc.), el tipo de analito (orgánico, inorgánico, volatilidad, etc.) y el propósito del análisis, a fin de asegurar la representatividad.
- Reconocer la importancia de la presencia de errores en la experimentación, y su influencia en los resultados obtenidos en los análisis químicos.
- Tomar conciencia de que la presencia de errores en la experimentación hace necesario el tratamiento estadístico de los datos experimentales y que existen diferentes tipos de test estadísticos para diversas situaciones.
- Analizar los datos procedentes de situaciones problemáticas reales y decidir, en base a su análisis, qué pruebas estadísticas son más apropiadas para dar respuesta al/los problema/s planteado/s.
- Conocer y aplicar apropiadamente las diferentes pruebas estadísticas.
- Aprender habilidades y conceptos relacionados con los métodos analíticos clásicos como valoraciones y gravimetrías.
- Investigar de manera colaborativa sobre diferentes estrategias para la resolución de problemas, para luego comunicar de manera correcta y efectiva sus descubrimientos a pares y/o docentes, de manera oral y/o escrita.
- Valorar la importancia de dar respuestas fundamentadas a los problemas planteados, teniendo como premisa la honestidad y expresando los resultados con calidad analítica.
- Elaborar informes de los resultados obtenidos, de manera clara y concisa, para entregarlos en el tiempo y forma establecidos.
- Adquirir la capacidad de fundamentar y defender sus resultados y las decisiones derivadas de los mismos, evaluando las implicancias de las respuestas brindadas y teniendo como base el respeto de las opiniones ajenas.
- Reflexionar acerca del hecho de que lo aprendido no es suficiente para su desarrollo profesional, pero que la manera de pensar y actuar desarrollada durante la asignatura le servirá para seguir aprendiendo.

METODOLOGÍA DE LA ENSEÑANZA

El dictado de la asignatura se realiza integrando de forma completa práctica y teoría (alternando el gabinete de computación y el laboratorio). Las clases teórico-prácticas son un espacio para el descubrimiento, la reflexión y la discusión de los temas planteados, e implican una alta participación del alumno. La intervención del docente se realizará para la exposición general de los temas y para aclarar cuestiones, siguiendo un modelo práctica-teoría-práctica. En el laboratorio se trabajará en comisiones grupales de no más de tres alumnos, a fin de fomentar y ejercitar el trabajo en equipo. Paralelamente, se utilizará la metodología de estudio de casos y la resolución de problemas siguiendo el mismo esquema de trabajo colaborativo utilizado en los laboratorios.

Se trabajará de forma de llevar adelante un seguimiento personalizado de cada alumno, que cuenta con disponibilidad de recursos informáticos que utilizará para realizar búsquedas, investigaciones y aplicaciones de distintas aplicaciones de tratamiento de datos para resolver los problemas planteados.

FORMA DE EVALUACIÓN

Se realizará la evaluación de manera continua, a través del trabajo en clase (ya sea en el laboratorio o en el gabinete) y de la entrega de trabajos escritos. También, con el objetivo de ejercitar la expresión oral, se organizarán sesiones de exposición y debate de resultados. Se contará además con dos instancias de evaluación teórico-práctica. A través de estos dos exámenes y de la evaluación continua los alumnos deberán demostrar que alcanzaron los objetivos planteados para cada uno de los módulos de la asignatura. En caso de no alcanzar alguno de los objetivos propuestos, el estudiante contará con una instancia de recuperación al final de la asignatura, en la que podrá acreditar los conocimientos/habilidades faltantes.

PROGRAMA SINTÉTICO**Módulo 1:** Los problemas analíticos y su resolución**Módulo 2:** El proceso de medida químico y las propiedades analíticas**Módulo 3:** Propiedades analíticas supremas: la representatividad**Módulo 4:** Métodos analíticos clásicos y aplicaciones del equilibrio ácido-base**Módulo 5:** Aplicaciones analíticas del equilibrio de formación de complejos**Módulo 6:** Aplicaciones analíticas de los equilibrios de óxido/reducción**Módulo 7:** Aplicaciones analíticas de equilibrios heterogéneos de precipitación**Módulo 8:** Exploración de los datos obtenidos**Módulo 9:** Los errores en la experimentación**Módulo 10:** Propiedades analíticas supremas: la exactitud**PROGRAMA ANALÍTICO:****Módulo 1: Los problemas analíticos y su resolución**

La Química Analítica actual. El objeto de estudio de la Química Analítica. La Química Analítica como ciencia metrológica. Implicancias de la nueva definición de Química Analítica. Característica multidisciplinaria de la Química Analítica. Tipos de problemas que ayuda a resolver la química analítica. Información analítica de calidad como requisito para la resolución de problemas. Proyección socio-económica de la Química Analítica. Referencias químico-analíticas. Química Analítica Verde

Módulo 2: El proceso de medida químico y las propiedades analíticas

El proceso de medida químico. Etapas generales del proceso. Las operaciones preliminares. Medición y transducción de la señal analítica. Adquisición y procesamiento de datos. Las propiedades del resultado y el proceso analítico. Propiedades analíticas supremas. Propiedades analíticas básicas. Propiedades analíticas complementarias. Propiedades analíticas y calidad de la información.

Módulo 3: Propiedades analíticas supremas: la representatividad

El estudio del problema analítico y el concepto de representatividad. Población y muestra, variable, datos. Resultado e información. Los niveles de la representatividad. El buen muestreo como base para lograr la representatividad. Consideraciones importantes para el muestreo. Diferentes estrategias de muestreo. Muestreo probabilístico y no probabilístico. Tipos y ejemplos de cada uno. Aplicación de técnicas de muestreo adecuadas a cada problema.

Módulo 4: Métodos analíticos clásicos y aplicaciones del equilibrio ácido-base

Métodos analíticos cuantitativos. Clasificación. Métodos clásicos: valoraciones y gravimetrías. Aspectos generales. Aplicaciones analíticas de equilibrios ácido – base. El concepto operacional de pH y diferencia con el pH. Preparación de disoluciones reguladoras. Volumetrías ácido – base. Curvas de valoración. Valoración de distintos tipos de ácidos y bases. Indicadores. Errores en valoraciones ácido – base.

Módulo 5: Aplicaciones analíticas del equilibrio de formación de complejos

Efecto de equilibrios secundarios. Volumetrías de formación de complejos. Curvas de valoración y factores que influyen. Indicadores.

Módulo 6: Aplicaciones analíticas de los equilibrios de óxido/reducción

Efecto de equilibrios secundarios. Volumetrías redox. Curvas de valoración y factores que las afectan. Tipos de indicadores redox. Errores en las volumetrías redox.

Módulo 7: Aplicaciones analíticas de equilibrios heterogéneos de precipitación

Formación, Contaminación y purificación de precipitados. Variables operacionales que afectan a los equilibrios de precipitación. Equilibrios secundarios. Volumetrías por precipitación. Curvas de valoración. Sistemas indicadores. Separación fraccionada. Gravimetrías. Introducción. Operaciones generales del análisis gravimétrico. Determinaciones gravimétricas por precipitación.

Módulo 8: Exploración de los datos obtenidos

Empleo de herramientas gráficas para visualizar los datos. Diferentes tipos de gráficos. Frecuencias e histogramas. Parámetros descriptivos de un conjunto de datos. Parámetros de localización o de tendencia central: Media, mediana, cuartiles, moda, rango medio. Parámetros que estiman la dispersión: rango, desviación estándar, desviación estándar relativa, varianza. Estimación de parámetros poblacionales. Noción de distribución de probabilidad. La distribución normal y otras distribuciones. Importancia de la distribución normal. La distribución normal estandarizada. Pruebas estadísticas para verificar la normalidad de un conjunto de datos. Teorema del límite central.

Módulo 9: Los errores en la experimentación

Errores en el análisis cuantitativo. Tipos de errores. Errores crasos, sistemáticos y aleatorios. Los errores y el resultado analítico. Expresión del resultado analítico. Límites de confianza e intervalo de confianza. Influencia de los distintos tipos de errores en las partes de un resultado. Cálculo y propagación de errores. Estrategias para eliminar o minimizar los distintos tipos de errores.

Módulo 10: Propiedades analíticas supremas: la exactitud

Conceptos de exactitud, precisión y veracidad. Relación entre errores, veracidad y precisión. Las pruebas de hipótesis. Pruebas estadísticas para evaluar la precisión: pruebas paramétricas y no paramétricas. Presencia de valores anómalos y cómo detectarlos. Test estadísticos para evaluar la veracidad: pruebas paramétricas y no paramétricas. Análisis de la varianza de un factor. Comparaciones múltiples entre diferentes valores medios. Expresión de resultados en valoraciones y gravimetrías.

TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO, GABINETE y SALIDAS DE CAMPO

Actividad N° 1: (Laboratorio) Calibración de material volumétrico y balanza analítica. Tratamiento estadístico de los mismos.

Actividad N°2: (Salida de campo). Muestreo de muestras líquidas, sólidas y gaseosas. Visita a muestreadores estáticos del Comité técnico ejecutivo de Bahía Blanca (aire), toma de muestras en el arroyo Napostá (aguas) y en un campo del Departamento de Agronomía (suelos). Aplicación de distintas técnicas de muestreo y conservación de la muestra para asegurar su representatividad.

Actividad N°3: (Laboratorio). Repaso de medidas de seguridad en el laboratorio de Química Analítica. Medidas de parámetros fisicoquímicos en las muestras colectadas. Repeticiones de medidas en una misma alícuota y en diferentes alícuotas de una misma muestra. Preparación general de reactivos a utilizar en los trabajos prácticos

Actividad N°4: (Gabinete). Exploración de datos. Empleo de herramientas gráficas para visualizar los datos obtenidos en la actividad N°3.

Actividad N°5: (Laboratorio) Estimación de los errores en la preparación de disoluciones.

Actividad N°6: (Laboratorio) Estandarización de una solución de NaOH frente a un patrón primario. Expresión de resultados.

Actividad N°7: (Laboratorio) Determinación del contenido ácido en vinagres mediante una valoración ácido-base. Expresión de resultados.

Actividad N°8: (Laboratorio) Determinación de calcio y magnesio en un extracto de suelo de las muestras colectadas en la Actividad N° 2 mediante una valoración complexométrica. Preparación de soluciones reguladoras. Expresión de resultados.

Actividad N°9: (Laboratorio) Determinación de cloruro en una muestra de solución fisiológica mediante una valoración por precipitación. Expresión de resultados.

Actividad N°10: (Laboratorio) Determinación gravimétrica de calcio en las muestras de leche. Expresión de resultados.

Actividad N°11: (Gabinete) Uso de test estadísticos para el estudio de la precisión y la veracidad.

Normas para el cursado y aprobación de la asignatura (sincrónica)

Los alumnos deberán asistir al 80 % de las clases teórico-prácticas. Se podrá justificar la inasistencia sólo mediante certificados.

Deberán aprobar con un mínimo de 60% los tres parciales teórico-prácticos de promoción. Existirá una instancia de recuperación al final del cuatrimestre.

Normas para el cursado y aprobación de la asignatura (asincrónica)

Los estudiantes deberán preparar trabajos y resolución de problemas que deberán ser entregados en tiempo y forma antes de cada examen a través de la plataforma Moodle.

BIBLIOGRAFÍA**Libros:**

- M. Valcárcel. Principios de Química Analítica, Ed. Springer – Verlag Iberica, 1999.
- M. Valcárcel Cases, M. A. López-Jiménez, A. I. López-Lorente. Foundations of Analytical Chemistry: A Teaching–Learning Approach. Springer, 2018.
- D.Skoog, D. West, F. Holler, S. Coruch. Fundamentos de Química Analítica, 9na ed. Cengage Learning, 2015.
- M. Silva, J. Barbosa. Equilibrios iónicos y sus aplicaciones analíticas. Editorial Síntesis, 2002.
- D. Harris, Análisis Químico Cuantitativo, 3ra ed. Editorial Reverte, 2016.G.
- Christian, P. Dasgupta, K. Schug, Analytical Chemistry, 7ma. Ed. John Wiley & Sons, Inc., 2014.
- C. Heumann, M. Schomaker. Introduction to statistics and data analysis. Springer International Publishing Switzerland, 2016.
- J. N. Miller, J. C. Miller. Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry. 6ta ed. Pearson, Harlow, 2010.
- D. L. Massart, B. G. Vandeginste, L. M. Buydens, S. De Jong, P. J. Lewi, J. Smeyers-Verbeke. Handbook of Chemometrics and Qualimetrics. Part A. Ed. Elsevier, 1997.
- D. L. Massart, B. G. Vandeginste, L. M. Buydens, S. De Jong, P. J. Lewi, J. Smeyers-Verbeke. Handbook of Chemometrics and Qualimetrics. Part B. Ed. Elsevier, 1998.
- R. E. Walpole, R. H. Myers, S. L., Myers, K. Ye. Probabilidad y estadística para ingeniería y ciencias. 9na ed. Pearson, 2012.
- M. Vivanco. Muestreo estadístico. Diseño y aplicaciones. Editorial universitaria, 2005.
- I. Espejo, F. Fernández, M. López, M. Muñoz, A., Rodríguez, A. Sánchez, C. Valero. Estadística descriptiva y probabilidad, (Teoría y problemas), 3ra ed. Servicio de Publicaciones. Universidad de Cádiz, 2006.
- I. Espejo, F. Fernández, M. López, M. Muñoz, A., Rodríguez, A. Sánchez, C. Valero. Inferencia estadística (Teoría y problemas), 3ra ed. Servicio de Publicaciones. Universidad de Cádiz, 2007.
- R. Crubellati, C. Di Risio, W. Beitia, N. Ramirez, C. Cordero, D. M. Rovira, D. M. R. Rodríguez Medina. Aspectos prácticos de la validación e incertidumbre en medidas químicas. 1ra ed. CYTED, Buenos Aires, 2009.

Artículos de divulgación:

- Grupo de Quimiometría de Tarragona, QUIMIOMETRÍA, Una disciplina útil para el análisis químico. Técnicas de laboratorio, 24 (2002), 412-416.
- P. L. López, Población muestra y muestreo. Punto cero, 9 (2004), 69-74.
- J. Riu, R. Boqué, A. Maroto, F.X. Rius. Exactitud y trazabilidad. Técnicas de Laboratorio. En: Universidad & Empresa, 22 (2000) 1.
- A. Maroto, R. Boqué, J. Riu, F.X. Rius (2001). Incertidumbre y precisión. Técnicas de laboratorio-Barcelona, 834-839.
- B. C. Jiménez. Estimación de la incertidumbre en mediciones químicas: un ejemplo práctico y simple. Revista Ingeniería, 23 (2013), 123-135.
- A. Maroto, R. Boqué, J. Riu, F. X. Rius (2002). Cálculo de incertidumbre en medidas físicas: medida de una masa. Técnicas de laboratorio-Barcelona, 730-735.

DEPARTAMENTO DE: QUÍMICA

PROGRAMA DE:

PRINCIPIOS DE QUÍMICA ANALÍTICA Y QUIMIOMETRÍA

CÓDIGO:

AREA NRO: III

Artículos científicos originales de los métodos estadísticos y otros:

- W. Horwitz, Nomenclature for sampling in analytical chemistry. IUPAC, Pure Appl. Chem., 62 (1990) 1193-1208.
- Shapiro, S. S., & Wilk, M. B. (1965). An analysis of variance test for normality (complete samples). Biometrika, 52(3/4), 591-611.
- Hartley, H. O. (1950). The maximum F-ratio as a short-cut test for heterogeneity of variance. Biometrika, 37(3/4), 308-312.
- J. C. Correa, R. Iral, L. Rojas. Estudio de potencia de pruebas de homogeneidad de varianza. Revista colombiana de estadística, 29 (2006) 57-76.
- W. G. Cochran. The distribution of the largest of a set of estimated variances as a fraction of their total. Annals of Eugenics, 11 (1941) 47-52.
- Siegel, S., & Tukey, J. W. (1960). A nonparametric sum of ranks procedure for relative spread in unpaired samples. Journal of the American Statistical Association, 55(291), 429-445.
- A. Böhre. One-sided and Two-sided Critical Values for Dixon's Outlier Test for Sample Sizes up to n= 30. Stochastics and Quality Control, 23 (2008) 5-13.
- F. E. Grubbs. Procedures for detecting outlying observations in samples. Technometrics, 11 (1969) 1-21.
- F. E. Grubbs, G. Beck, G. (1972). Extension of sample sizes and percentage points for significance tests of outlying observations. Technometrics, 14 (1972) 847-854.
- F. E. Satterthwaite, F. E. An Approximate Distribution of Estimates of Variance Components, Biometrics 2 (1946) 110-114.
- B. L. Welch, The generalization of "student's" problem when several different population variances are involved, Biometrika 34 (1947) 28-35.

Guías y normas:

- ISO 2854-1976 (E) Statistical interpretation of data. Techniques of estimation and tests relating to means and variances, 1976.
- ISO 3534-1977 (E/F), Statistics — Vocabulary and Symbols, 1977
- ISO 5725-1:1994 Accuracy (trueness and precision) of measurement methods and results — Part 1: General principles and definitions. ISO, Ginebra, 1993
- ISO 384:2015 Laboratory glass and plastics ware — Principles of design and construction of volumetric instruments, 2015.
- Guía CG 4 EURACHEM / CITAC, S. L. R. Ellison, A. Williams (eds.) Cuantificación de la Incertidumbre en Medidas Analíticas, 3ra ed. Inglesa, 1ra ed. Española, Eurolab, Madrid, 2012.
- ISO Standard 5725-1986 (E) Precision of test methods - Determination of repeatability and reproducibility for a standard test method for inter-laboratory tests
- ISO Standard 5725-2:1994 (E), Accuracy (trueness and precision) of measurement methods and results. Part 2 (1994).

AÑO	PROFESORA RESPONSABLE (firma aclarada)	AÑO	PROFESORA RESPONSABLE (firma aclarada)
2022	Dr. Mariano E. Garrido		
V I S A D O			
COORDINADORA ÁREA		SECRETARIO/A ACADÉMICO/A	
FECHA:		FECHA:	