

Q I 2000
(4)

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA

CARRERA: Doctorado en Ciencias Químicas

ORIENTACION: ---

1er. CUATRIMESTRE: AÑO 2000

CODIGO DE CARRERA: 51

MATERIA: *Tópicos Modernos de Química Analítica*

CODIGO: 5081

PUNTAJE: propuesto 5 puntos.

PLAN DE ESTUDIO: ---

CARACTER DE LA MATERIA: ----

DURACION: cuatrimestral

HORAS DE CLASE SEMANAL:

- * Teóricas: 4 hs.
- * Problemas: 2 hs.
- * Laboratorio: 4 hs.

TOTAL: 10 hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 160 hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Licenciatura en Cs. Químicas

FORMA DE EVALUACION: 2 exámenes parciales y 1 examen final.

PROGRAMA ANALITICO:

Unidad 1. Teoría de muestreo. Aspectos estadísticos. Estrategias para obtención de muestras ambientales. Muestreo de aire, agua, matrices biológicas, suelos y sedimentos. Interdependencia entre muestreo y selección de la técnica analítica. Diseño de protocolos de muestreo.
(2 horas)

Unidad 2. Acondicionamiento y preparación de muestras. Molienda de sólidos. Digestión y disolución mediante microondas. Disolución selectiva. Requerimientos para la selección de diferentes niveles de áreas y laboratorios "limpios".
(2 horas)

Unidad 3. Fundamentos y aplicaciones de dispositivos electrónicos en la instrumentación utilizada en química analítica. Transductores de señales químicas. Modificadores de señal y acoplamientos de impedancia. Aplicaciones de la tecnología de semiconductores : principios básicos de circuitos. Conversión analógica ↔ digital. Introducción al empleo de microprocesadores y computadoras digitales en la operación y control instrumental.
(2 horas)

(Handwritten signature)

Unidad 4. Adquisición y procesamiento de señales digitalizadas. Muestreo de señales. Relación señal/ruido. Tipos de ruido. Técnicas para reducción del ruido de señal: promediado, suavizado, filtrado en el dominio de frecuencias. Interpolación. Deconvolución de picos.

Automatización: objetivos y alcance. Niveles de automatización de las operaciones analíticas. Robots y sistemas inteligentes. Sistemas expertos.

(4 horas)

Unidad 5. Análisis espectroquímico con fuentes de plasma. Espectrometría de masas inorgánica. Generación de iones mediante plasmas de radiofrecuencia (ICP-MS) y mediante descargas de baja presión. Extracción de iones y óptica de enfoque. Sistemas para discriminación de masas: cuadrupolos, cuadrupolos con prefiltro y posfiltro, dispositivos magnéticos de doble enfoque para alta resolución. Inyección de muestras líquidas y sólidas. Análisis isotópico de micromuestras. Aplicaciones medioambientales, geológicas, químicas y en ciencia de materiales.

(4 horas)

Unidad 6. Métodos combinados. Criterios generales para la combinación en línea de métodos separativos y determinativos. Separaciones cromatográficas. Formación de derivados. Generación de hidruros gaseosos. Detección espectroscópica selectiva. Principales combinaciones para análisis elemental: cromatografías gaseosa y líquida de alta resolución con detección espectroscópica por emisión y absorción atómicas y por espectrometría de masas con fuente de plasma. Preconcentración en línea. Análisis por inyección en flujo (FIA). Automatización.

(4 horas)

Unidad 7. Especiación química de metales y metaloides. Alcance y definiciones. Preservación de las muestras. Técnicas principales: métodos directos e híbridos. Ejemplos de aplicaciones: especiación de elementos en la atmósfera, aguas, suelos, sedimentos y residuos de combustión.

(2 horas)

Unidad 8. Análisis elemental mediante técnicas de rayos X. Fundamentos. Análisis no destructivo. Instrumentación. Fluorescencia por rayos X dispersiva en longitud de onda (WDXRF) y dispersiva en energía (EDXRF). Técnicas especiales para determinación de trazas: reflexión total (TRXRF).

(2 horas)

Unidad 9. Métodos electroquímicos para análisis de micromuestras. Fundamentos de electroquímica orientados a la comprensión de las técnicas en flujo y ultramicroelectrodos: transferencia de masa, polarización por corriente continua. Corriente capacitiva y faradaica, efecto de la caída ohmica. Técnicas de corriente alterna y de pulsos. Ultramicroelectrodos: diseño y construcción. Instrumentación. Aplicaciones analíticas de los ultramicroelectrodos: trabajo con solventes no acuosos y acuosos con bajo electrolito soporte, redisolución anódica. Técnicas relacionadas: microscopia electroquímica de barrido (SEM). Celdas y microelectrodos para detección amperométrica en flujo: celdas de capa delgada, sistemas "wall jet", microelectrodos de disco, banda tubular, cilíndrico y lineal. Electroodos específicos basados en transistores de efecto de campo (ISFET).

(8 horas)

Unidad 10. Métodos quimiométricos, su necesidad e importancia dentro de la Química Analítica moderna. Observaciones univariantes y multivariantes. Definiciones de sensibilidad, límite de detección y límite de determinación. Intervalos de confianza. Optimización de variables de operación. Selección de métodos de calibración. Redes neuronales, su aplicación en quimiometría y química analítica.

(6 horas)

Unidad 11. Aspectos generales del control y garantía de calidad en química analítica. Metrología química. Trazabilidad. Validación de métodos analíticos. Comparación interlaboratorios.

(2 horas)

//..

..//

Bibliografía:

- 1) H.H. Williard, L.L. Merrit, J.A. Dean, F.A. Settle, **Instrumental Methods of Analysis**, Wadsworth Pub. Co., Belmont, CA, 1988. (Existe traducción al español).
- 2) R. Kellner, J.M. Mermet, M Otto, H.M. Widmer, eds., **Analytical Chemistry**, Wiley-VCH, Weinheim, 1998.
- 3) A.J. Diefenderfer. **Principles of Electronic Instrumentation**. Saunders College Publishing, Philadelphia, 1978.
- 4) L.H. Keith, **Environmental Sampling and Analysis**, Lewis Pub., 1991.
- 5) A.M. Ure, C.M. Davidson, eds., **Chemical Speciation in the Environment**, Blackie (Chapman & Hall), Londres, 1995.
- 6) A. Montaser, D.W. Golightly, eds., **Inductively Coupled Plasmas in Analytical Atomic Spectrometry**, VCH, New York, 1992.
- 7) K.H. Oldham and J.C. Myland. **Fundamentals of Electrochemical Science**. Accademic Press. Inc. 1994.
- 8) P.Kissinger and W.R. Heineman. **Laboratory Techniques in Electroanalytical Chemistry**. Marcel Dekker, Inc. New York, 1984.
- 9) J. Wang. **Analytical Electrochemistry**. VCH, New York, 1994.
- 10) M.J. Adams, **Chemometrics in Analytical Spectroscopy**. The Royal Society of Chemistry, Londres, 1995.
- 11) D.L. Massart, B.G.M. Vandeginste, S.N. Demming, Y. Michotte y L. Kaufman. **Chemometrics: a textbook**. Elsevier, New York, 1988.
- 12) J. Einax, volume ed. Volume 2 Part H. **Chemometrics in environmental Chemistry – Applications**. Springer Verlag, Berlín Heidelberg, 1995.
- 13) J. Zupan and J. Gasteiger. **Neural Networks for Chemistry**. VCH, Weinheim, Federal republic of Germany, 1993.

Dr. J.F. Magallanes


Dr. D.A. Batistoni



Dra. LELIA S. DIXELIO
Directora Adjunta
Dep. QCA. UNAM, UNAM, UNAM, P.R.