



**PROGRAMA ANALÍTICO DE LA ASIGNATURA
TÉCNICAS ANALÍTICAS INSTRUMENTALES
Modalidad Libre**

Departamento de Ciencia y Tecnología

Carrera Ingeniería en Alimentos

Núcleo Inicial Complementario / Superior Complementario

Prerrequisito obligatorio: Química Orgánica I

Carga horaria total: 108 horas

Docentes: Alejandro Ferrari - Gerardo Caballero - Carolina Martínez - Juan Abdusetir - Diego Vázquez.

Año lectivo: 2023 y 2024

Objetivos

Los objetivos para quienes cursen la asignatura son:

- Comprender los principios generales de los métodos instrumentales más importantes
- Comprender la naturaleza del problema analítico y establecer una estrategia de resolución
- Correlacionar las propiedades físicas y químicas del analito, y el tipo de matriz en la que se encuentra el analito, con el método instrumental a utilizar.
- Interpretar la información estructural y cuantitativa obtenida con los métodos instrumentales más importantes.
- Aprender a manejar las herramientas estadísticas necesarias para determinar parámetros quimiométricos que reflejen la calidad de los datos obtenidos.
- Interpretar normas, literatura científica, etc. relacionadas con la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos en matrices complejas (biológicas y alimentos) y su evaluación.
- Poder comunicarse con facilidad con especialistas en química instrumental.

Saberes profesionales

En la asignatura se propician los siguientes saberes profesionales:

- Utilizar técnicas y herramientas de aplicación en la ingeniería en alimentos.
- Comunicarse de manera efectiva.

Contenidos mínimos: Métodos espectroscópicos, cromatográficos, electroquímicos, radioquímicos y electroforéticos. Introducción a la quimiometría. Determinación de estructuras con métodos instrumentales.

Programa analítico

Unidad 1. Espectroscopia molecular ultravioleta-visible. Introducción a la espectroscopia. Interacción de la luz con la materia. Análisis cuantitativo: Ley de Lambert-Beer. Espectros moleculares de absorción. Transiciones electrónicas. Cromóforos y auxocromos. Aplicaciones orgánicas e inorgánicas. Caracterización de grupos funcionales. Instrumental.

Unidad 2. Espectroscopia infrarroja. Vibraciones moleculares. Descripción clásica y cuántica. Bandas características de grupos funcionales. Aplicaciones cualitativas. Instrumental.

Unidad 3. Espectrometría de resonancia magnética nuclear. Niveles de energía nucleares. Descripción cuántica y clásica del fenómeno. Spin nuclear. Apantallamiento. Desplazamiento químico. Multiplicidad de las señales. Acoplamiento spin-spin. Aplicaciones: predicción de estructuras moleculares. Instrumental.

Unidad 4. Espectrometría de masa. Fragmentaciones moleculares. Ion molecular y pico base. Componentes isotópicos. Clusters. Patrones de fragmentación. Determinación de la fórmula molecular. Postulación de estructuras moleculares. Instrumental.

Unidad 5. Evaluación de datos analíticos. Introducción a la Quimiometría. Errores experimentales. Estadística de medidas repetidas. Precisión y exactitud. Límite de

detección. Sensibilidad. Métodos de calibración. Regresión lineal. Aseguramiento de la calidad analítica.

Unidad 6. Espectroscopia luminiscente. Estados singlete y triplete. Espectros de excitación y de emisión. Fluorescencia y fosforescencia. Decaimiento no radiativo. Quenching. Eficiencia cuántica. Emisión y estructura molecular. Aplicaciones. Instrumental. Quimioluminiscencia.

Unidad 7. Espectroscopia atómica. Transiciones electrónicas en átomos. Absorción y emisión atómica. Atomización térmica y electrotérmica. Emisión por plasma inducido. Aplicaciones. Instrumental.

Unidad 8. Cromatografía gaseosa . Introducción a la cromatografía. Parámetros de retención y de eficiencia. Dispersión en la columna: ecuación de Van Deemter. Mecanismos de retención: adsorción y reparto gas-líquido. Fases estacionarias y tipos de columnas. Optimización de la separación. Temperatura programada. Instrumentación. Derivatización. Extracción head-space. Pretratamiento de muestras. Análisis cuantitativo.

Unidad 9. Cromatografía líquida. Mecanismos de retención: adsorción, interacción hidrofóbica, intercambio iónico, pares iónicos, exclusión molecular. Elución con gradiente. Instrumental. Derivatización. Pretratamiento de muestras.

Unidad 10. Otras técnicas. Métodos radioquímicos. Electroforesis capilar. Cromatografía gaseosa acoplada a espectrometría de masa. Potenciometría.

Unidad 11. Aseguramiento de la calidad en laboratorios . Definición de calidad. Organización de un sistema de calidad. Normas ISO, buenas prácticas. Requerimientos generales, monitoreo y control.

Trabajos prácticos de laboratorio

La nómina de TP y sus objetivos son:

TP N°1: Caracterización de moléculas por espectrofotometría UV-visible y comprobación de la Ley de Lambert y Beer. Conocer el manejo del espectrofotómetro UV-visible. Registrar espectros de absorción de moléculas orgánicas e inorgánicas. Comprobar corrimientos de los máximos de absorción. Confección y ajuste de curva de

Calibración según parámetros de calidad analítica. Comprobación de la ley de Lambert-Beer.

TP N°2: Análisis cuantitativo por espectrofotometría UV-visible. Aprender a procesar muestras sólidas y/o líquidas para su análisis químico. Cuantificar una sustancia problema utilizando la recta de calibración ajustada y mediante la aplicación de métodos colorimétricos.

TP N°3: Análisis cualitativo y cuantitativo de emisión fluorescente. Obtener los espectros de excitación y emisión de la fluoresceína. Aprender a manejar un espectrofotómetro compacto para análisis de micromuestras. Cuantificar un analito mediante un método de calibración externa y la medida de absorbancia e intensidad de emisión.

Bibliografía

Bibliografía obligatoria:

- Skoog, D. A., Holler, J. F., & Crouch, S. R. (2008). Principios de análisis instrumental (6a. ed.). Madrid: Cengage Learning.
- Harris, D. C. (2010). Quantitative chemical analysis (8th ed.). New York: Freeman.
- Rouessac, F., Rouessac, A. (2003). Análisis químico: Métodos y técnicas instrumentales modernas. Madrid: McGraw-Hill.
- Carey, F. (1999) Química Orgánica. (3a ed.) México, Mc Graw Hill.

Bibliografía general de consulta:

- Bruice, P. Y. (2008). Química orgánica (5a. ed.). Naucalpan de Juárez, Edo. de México: Pearson Educación.
- Willard, H. H., Merritt, L. L., Dean, J. A., & Settle, F. (1991). Métodos instrumentales de análisis. México, DF: Grupo Editorial Iberoamérica.
- Silverstein, R. M., & Webster, F. X. (1997). Spectrometric identification of organic compounds (6a. ed.). New York: J. Wiley.

Formas de evaluación y acreditación

La modalidad de evaluación y aprobación se regirá según el Régimen de Estudios vigente. En la mesa de examen libre se evaluarán los temas de la asignatura con una primera instancia de evaluación escrita que comprenderá los aspectos teórico-prácticos de los tres trabajos prácticos de la cursada regular. De aprobar esta actividad, al día siguiente, habrá una segunda instancia escrita u oral que abarcará todas las unidades del programa donde se evaluarán los conocimientos teóricos de los métodos espectroscópicos y cromatográficos, y una evaluación de ejercicios combinados de interpretación de espectros de infrarrojo, de RMN y de masa.