Universidad de Navarra

Métodos de separación y quimiometría (F.Ciencias)
Guía docente 2026-27

PRESENTACIÓN

Descripción de la asignatura: La materia "Métodos de separación y Quimiometría" completa la formación analítica del estudiante del Grado en Química y el Doble Grado de Química y Bioquímica con el estudio de los métodos analíticos de separación, cinéticos y automatizados, y aborda mediante el analisis quimiométrico, el tratamiento estadístico de los datos experimentales, porporcionando las herramientas necesarias para la extracción de información de los sistemas químicos de cuantificación. La asignatura se imparte en el aula mediante i) lección magistral con continuas referencias a ejemplos de análisis prácticos en laboratorio docente e industria, incitando la intervención participativa del alumno motivándolo a resolver, mediante un diálogo activo, las cuestiones que pudieran surgir, ii) seminarios en los que se resolverán problemas y cuestiones teórico-prácticas, con interpretación de datos y cálculos numéricos, y iii) la resolución de trabajos prácticos con objeto de resolver cuestiones prácticas planteadas en los diferentes bloques temáticos impartidos. Por último, se visualizarán, interpretarán y discutirán vídeos que resolverán las estrategias más comunes empleadas en las actuales metodologías de análisis.

- **Titulaciones:** Grado en Química y Grado en Química y Bioquímica
- **Módulo y materia de la asignatura:** Módulo II (Fundamentos Teóricos de la Química). Materia I (Química Analítica)
- **Número de créditos:** 6,0 ECTS
- **Curso, semestre:** 4º, 1er cuatrimestre
- **Carácter:** Obligatoria
- **Profesor responsable:** Iñigo Navarro Blasco
- **Idioma en que se imparte:** Castellano-Inglés
- **Horario:** establecido por la Coordinación y disponible en el Portal de Horarios de Publish
- **Requisitos:** Conocimientos previos de Química Analítica Cuantitativa e Instrumental (Química Analítica Cuantitativa, 2º y 3º Química) y Principios básicos de experimentación y laboratorio Instrumental en Química Analítica (Laboratorio de Análisis Fundamental y Laboratorio de Análisis Instrumental, 2º y 3º Química).

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Competencias)

Las competencias específicas, básicas y generales que se describen a continuación son exigibles para todo alumno que curse la asignatura y se traducen en los correspondientes resultados de aprendizaje.

Competencias específicas

El programa de la asignatura permite el desempeño de una gran capacitación, concretándose en la adquisición de las siguientes habilidades y destrezas personales específicas, descritas en la memoria de Verificación del título de grado en Química impartido por la Universidad de Navarra:

- CE 1. Analizar y resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados, así como reconocer nuevos problemas y planificar de estrategias para su resolución.
- CE 2. Procesar, computar, evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
- CE 8. Llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorios tanto analíticos como de síntesis, en sistemas orgánicos e inorgánicos, cumpliendo con la praxis Química adecuada y una manipulación segura de los materiales y reactivos químicos.
- CE 10. Conocer los tipos de reacciones Químicas, además de su cinética y catálisis. Comprender la aplicación de las reacciones a los procedimientos usados en el análisis químico para identificar, caracterizar y determinar los compuestos químicos.

Competencias básicas

El programa de la asignatura también garantiza la adquisición, por el estudiante de grado, de las siguientes competencias relativas al conocimiento químico analítico básico, descritas en la memoria de Verificación del título de grado en Química impartido por la Universidad de Navarra:

- CB 1. Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.
- CB 2. Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.
- CB 3. Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.
- CB 4. Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.
- CB 5. Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

Competencias generales

Asimismo, el programa de la asignatura integra las competencias generales relativas al campo de aplicación químico analítico que se enumeran en la memoria de Verificación del título de grado en Química impartido por la Universidad de Navarra, como:

- CG 1. Planificar y organizar el tiempo y gestionar la propia formación continua, actualizando el conocimiento de las innovaciones del ámbito científico y saber analizar las tendencias de futuro.
- CG 2. Pensar de forma integrada y abordar los problemas desde diferentes perspectivas. Tener razonamiento crítico. Aportar soluciones a problemas en el ámbito científico.
- CG 3. Trabajar en equipo, seleccionar y elegir la metodología de trabajo y distribución de funciones. Saber escuchar y hacer uso de la palabra con intervenciones positivas y constructivas.
- CG 6. Usar correctamente el método de inducción. Ser capaz de generalizar el conocimiento obtenido en una ocasión a otros casos u ocasiones semejantes que puedan presentarse en el futuro.

Resultados del aprendizaje

Los resultados de aprendizaje se traducen desde las competencias adquiridas y cabe enumerarlos en:

- Demostrar conocimiento, comprensión y capacidades prácticas en relación con las competencias descritas, comprobado por los exámenes y pruebas de diverso tipo realizadas.
- Interpretar y valorar los resultados obtenidos por las distintas técnicas instrumentales.
- Demostrar capacidad de relación entre las distintas materias del módulo encaminada a la resolución de problemas integrados.

Objetivos de la asignatura

Asimismo, la asignatura de Métodos de Separación y Quimiometría pretende conseguir que el alumno adquiera los siguientes objetivos:

Objetivos de contenidos

- Complemente su formación analítica con el estudio de los métodos analíticos de separación, cinéticos y automáticos, y aborde mediante el análisis quimiométrico, la etapa final de tratamiento estadístico de los datos experimentales.
- Profundice, mediante trabajos bibliográficos de investigación, en los procesos experimentales avanzados para la determinación de analitos en múltiples matrices de análisis.

Objetivos de habilidades y competencias

- Integre los conocimientos analíticos adquiridos en el diseño de estrategias para la elaboración de nuevas metodologías analíticas.
- Plantee con rigor científico un protocolo de análisis, considerando todas las etapas del proceso analítico, para la obtención de resultados fiables con una metodología adecuada a las posibilidades del laboratorio analítico.
- Resuelva, con especial soltura, las cuestiones teórico-prácticas planteadas en las metodologías de análisis más comunes, en especial, las de actual relevancia.

PROGRAMA

I. Quimiometría

Tema 1. Definición de Quimiometría. Errores en análisis . Tipo de distribuciones. Ensayos de hipótesis. Valores discrepantes. Análisis de la varianza (Anova).

Tema 2. Calibración. Modelos de calibración: modelo lineal univariante y modedo multivariante. Regresión lineal simple (mínimos cuadrados): errores en la recta de regresión. Límite de detección y cuantificación. Intervalo dinámico lineal. Tipos de calibración: externa e interna (patrón interno y adición estándar).

Tema 3. Diseño experimental y optimización. Diseño experimental: diseño factorial frente a clásico. Diseño factorial y optimización. Métodos de optimización: máxima pendiente y simplex.

II. Métodos Analíticos de Separación

Tema 4. Introducción a los métodos de separación. Técnicas de separación no cromatográficas. Métodos cromatográficos: Descripción general.

Tema 5. Métodos de separación. Clasificación y fundamento. Velocidad de migración. Tiempo de retención. Factores de capacidad y selectividad. Ensanchamiento de banda y eficacia. Resolución. Optimización de la separación cromatográfica. Aplicaciones: Análisis cualitativo y cuantitativo.

Tema 6. Técnicas de separación cromatográficas. Cromatografía plana. Cromatografía gas-líquido: Introducción, Instrumentos, Fases líquidas, Aplicaciones. Cromatografía líquida de alta resolución: Introducción, Instrumentos, Cromatografía de reparto de alta resolución, Cromatografía de adsorción de alta resolución, Cromatografía iónica de alta resolución, Cromatografía de exclusión por tamaño de alta resolución. Introducción a las técnicas cromatográficas acopladas.

III. Métodos Cinéticos de Análisis

Tema 7. Características fundamentales de los métodos cinéticos. Ventajas y clasificación de los métodos cinéticos. Velocidad de reacción química: Terminología ; Ley de velocidad de reacción de primer, pseudoprimer y segundo orden. Métodos experimentales.

Tema 8. Métodos catalíticos no enzimáticos. Ecuaciones cinéticas y mecanismo de reacción. Métodos diferenciales. Procedimientos basados en las curvas cinéticas: Métodos de las tangentes. Procedimientos basados en la medida del periodo de inducción. Reacciones químicas oscilantes. Volumetrías catalimétricas. Métodos catalíticos en sistemas abiertos.

Tema 9. Métodos enzimáticos de análisis. Cinética de las reacciones enzimáticas y mecanismo de reacción. Activadores e inhibidores. Aplicaciones analíticas.

Tema 10. Métodos de reacciones no catalizadas. Procedimiento directo. Métodos derivativos. Métodos integrales. Métodos cinéticos diferenciales para el análisis de mezclas: Análisis de sustancias que reaccionan con diferente velocidad; Método de la extrapolación logarítmica (pseudoprimer y segundo orden); Método de las ecuaciones proporcionales o del doble punto; Método del punto único; Método de la pseudoconstante de velocidad o de la tangente.

IV. Métodos Automatizados de Análisis

Tema 11. Automatización en el laboratorio analítico. Objetivos y características, ventajas e inconvenientes de los métodos de análisis automáticos. Clasificación. Automatización integral: Tipos y generalidades de los Analizadores.

Tema 12. Métodos automatizados de análisis de flujo continuo (I). Analizadores de flujo segmentado: Esquema general, componentes y configuraciones multicanal; Aplicaciones. Analizadores de flujo no segmentado: Introducción y características esenciales del análisis por inyección en flujo. Fiagrama. Fundamento del FIA: mecanismos, modelos e influencia de parámetros instrumentales en la dispersión.

Tema 13. Métodos automatizados de análisis de flujo continuo (II). Esquema general y configuración de FIA. Modalidades y aplicaciones de FIA. Métodos cinéticos desarrollados por FIA: interrupción del flujo (stopped flow) y métodos basados en cinética diferencial. Comparación entre analizadores continuos de flujo segmentado y no segmentado.

Tema 14. Métodos automatizados discontinuos y estaciones robotizadas. Clasificación de los Analizadores discontinuos. Analizadores clínicos. Analizadores centrífugos. Analizadores elementales. Analizadores genéticos. Estaciones robotizadas: Clasificación y características. Analizadores de procesos. Comparación entre analizadores continuos, discontinuos y robotizados.

Programa Seminarios y Problemas

Sesiones de Seminarios

Seminario 1. Planteamiento de Problemas de estadística básica de resultados analíticos, valores discrepantes, pruebas de hipótesis, y calibración.

Seminario 2. Análisis de regresión. Calibración externa e interna.

Seminario 3. Diseño experimental y método de optimización simplex.

Seminario 4. Aplicaciones experimentales de metodologías basadas en FIA para el análisis de analitos en matrices específicas.

Sesiones de problemas

Problemas 1. Quimiometría. Evaluación de los parámetros útiles en la validación de métodos analíticos. Predicción de la incertidumbre de un resultado de análisis.

Problemas 2. Evaluación de parámetros en un cromatograma. Optimización y evaluación de la resolución de una separación cromatográfica en columna.

Problemas 3. Ecuaciones cinéticas, métodos cinéticos de análisis a tiempo fijo y variable, método de la pendiente, análisis de reacciones catalíticas: determinación de catalizadores, análisis enzimáticos: determinación de sustratos, análisis de mezclas.

Problemas 4. Determinación de parámetros en un Fiagrama. Análisis de las variables experimentales para la optimización de un sistema FIA. Cálculos numéricos de cuantificación.

ACTIVIDADES FORMATIVAS

Metodología docente y Actividades formativas

1. **Sesiones teóricas presenciales en aula** (4 clases semanales, un total de 46 horas). El área interna del Aula Virtual ADI proporcionará al alumno todo el material utilizado en el aula para impartir las sesiones presenciales. Asimismo, las clases teóricas se apoyarán en presentaciones powerpoint visualizadas mediante cañón de proyección, el empleo de pizarra (convencional y/o digital, dependiendo de los medios disponibles en aula) y/o el uso de otras aplicaciones (excel, pdf, software estadístico, socrative) y múltiples vídeos y aplicaciones de páginas web analíticas que facilitan la comprensión de los conceptos impartidos. La realización de las pruebas de seguimiento y evaluación continua requiere del alumno la disponibilidad de un dispositivo móvil u ordenador personal
2. **Seminarios presenciales de resolución de problemas y casos prácticos** (12 sesiones, 12 horas). Cada bloque temático desarrolla un programa teórico que se acompaña de la resolución de una serie de problemas y cuestiones teórico-practicas asociadas que se resolverán en los seminarios planteados en el calendario académico.
3. **Trabajo personal** dedicado a la preparación de los seminarios, resolución de cuestiones y problemas, y presentaciones orales (9,5-10,5 horas). Los seminarios impartidos requieren un trabajo previo por parte del alumnado con objeto de alcanzar su plena comprensión. Asimismo, se solicitará el diseño y defensa de trabajos teórico-prácticos evaluables (p.ejm. diseño de una hoja de cálculo o planteamiento de protocolo analítico,...), individualmente o grupalmente, relacionados con la materia impartida. La presentación de los trabajos se realizarán presencialmente en aula.
4. **Estudio personal del alumno** y manejo de bibliografía (75 horas). Aquí se considera el tiempo real dedicado al estudio e interiorización de los conceptos impartidos en la asignatura y a la realización de las distintas cuestiones y problemas propuestas para la plena comprensión de los conocimientos.
5. **Tutorías con el profesor** (se estima un número de horas de 0,5-1,5; dependiendo de la atención personalizada requerida por cada alumnos de manera individualizada presencialmente en despacho.
6. Realización de **exámenes** (6 horas). El apartado de evaluación contiene toda información relativa la realización de exámenes a lo largo del curso y el modo de evaluación.

Distribución temporal

Actividad formativa	***Distribución***	***Créditos***	***Porcentaje***
1. Clases teóricas presenciales	46 horas	1,84 ECTS	30,66%
2. Seminarios presenciales: resolución de problemas y cuestiones	12 horas	0,48 ECTS	8,00%
3. Trabajo personal dedicado resolución de cuestiones y problemas	10 horas	0,40 ECTS	6,66%
4. Tutorías con el profesor	1 hora	0,04 ECTS	0,66%
5. Realización de exámenes presenciales	6 horas	0,24 ECTS	4,00%

Total actividades presenciales	*75 horas*	*3,00 ECTS*	*50,00%*
6. Estudio personal del alumno y manejo de bibliografía	75 horas	3,00 ECTS	50,00%
Total	**150 horas**	**6,0 ECTS**	**100%**

EVALUACIÓN

CONVOCATORIA ORDINARIA

Aspectos generales

La evaluación de la asignatura contemplará los siguientes aspectos: *(i)* un **ejercicio de evaluación con carácter liberatorio** de cada uno de los dos primeros bloques temáticos impartidos; *(ii)* un **ejercicio de evaluación al final del cuatrimestre**; *(iii)* **ejercicios del seguimiento** del aprendizaje y evaluación continua periódicos realizados en aula; *(iv)* **entrega y defensa de los trabajos prácticos** solicitados al alumnado a lo largo del cuatrimestre; y, *(v)* **realización de los problemas propuestos y participación activa** en los seminarios y las sesiones de problemas.

Calificación final

La calificación final de la asignatura se obtendrá de la consideración del **ejercicio parcial de evaluación** realizado (35% para el alumnado liberado) y el **ejercicio final** (35% para el alumnado liberado, y 70% para el alumnado que se examine de todos los bloques temáticos). Los ejercicios de seguimiento y evaluación continua otorgan un 20% de la calificación, mientras que la valoración de los **trabajos prácticos solicitados** consideran un 10% de la nota final. Por último, la **participación activa en las sesiones de seminarios y problemas** podrán ser empleados además para incrementar hasta un grado la calificación de aquellos alumnos que hayan superado las pruebas de los conocimientos teórico-prácticos.

La nota final se obtendrá mediante la suma porcentual de todas las actividades evaluables establecidas. Para llevar a cabo el cálculo será necesario alcanzar una nota mínima de 4,5 (sobre 10) en el ejercicio final. En aquel caso de que no se alcance la nota mínima, se calificará con la puntuación del examen sin considerar las restantes actividades evaluables. Una puntuación de los ejercicios parcial y final sin promediar más alta que la nota obtenida con la suma promedio que favorezca al alumno, será la empleada para su calificación final.

CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA

El ejercicio de evaluación y la calificación de la convocatoria extraordinaria observarán similar pauta a la convocatoria ordinaria. Es decir, se obtendrá de la consideración conjunta de *(i)* los ejercicios de evaluación intermedios superados, los trabajos prácticos solicitados y la participación activa en las sesiones de seminarios y problemas (20%), siempre y cuando el alumno haya superado el examen extraordinario; *(ii)* los ejercicios de evaluación continua (20%), y *(iii)* el ejercicio escrito final (60%). De igual manera, para obtener la calificación global, considerando la suma porcentual, se requiere una nota mínima de 4,5 (sobre 10) en el examen

final extraordinario. Se considerará exclusivamente la calificación del examen extraordinario, sin promediar con las restantes actividades de evaluación, cuando ésta sea más favorable al estudiante.

Características de los exámenes y ejercicios de evaluación continua

Los ejercicios de evaluación constan de un primer apartado con preguntas de respuesta múltiple; en segundo lugar, preguntas teórico-prácticas cortas; y por último un tema característico de cada bloque temático con carácter numérico-práctico. Los diversos apartados se corregirán por independiente, siendo necesario superar cada uno de ellos para aprobar el ejercicio.

Los ejercicios de evaluación continua se realizaran a lo largo de todo el curso, se llevarán a cabo en clase (habitualmente antes del inicio de la misma). Las pruebas de evaluación continua emplearán cuestiones de respuesta múltiple o sentencias de verdadero-falso; de ordinario mediante plataforma digital online: Socrative, Examinador ADI, Kahoot, ... o excepcionalmente en papel. Tendrán una duración de 5-10 minutos. Estos ejercicios de seguimiento se realizarán exclusivamente en el día señalado, y no serán, por tanto, recuperables para el alumnado ausente.

Las actividades evaluables -los trabajos prácticos y el examen parcial- se realizarán en unas fechas determinadas establecidas previamente en el horario del curso.

Nota. Para aquellos alumnos que requirieran necesidades educativas especiales, acreditados previamente e informado por Vicedecanato de Alumnos de la Facultad de Ciencias, se podrá adaptar en ese caso el sistema de evaluación de acuerdo a su singularidad sin que ello supusiera algún tipo de agravio con el resto del alumnado ni se vieran alteradas las competencias y objetivos a alcanzar por parte del alumno implicado.

Observación 1. El comportamiento poco éticos de intento o logro de plagio o copia en los ejercicio de evaluación continua y/o exámenes parciales o finales mediante cualquier medio, en papel, teléfonos móviles, dispositivos inalámbricos, auriculares ... o en conversación con un compañero de aula, será severamente penalizados con la expulsión inmediata del examen y la calificación de 0 en la convocatoria. Ello supone una infracción grave tal y como está contemplado en el título IV "Normas de disciplina académica de los estudiantes" dentro del Sistema de normas sobre la convivencia en la Universidad de Navarra. Se incluyen aquí los intentos de resolver los ejercicios de evaluación continua a distancia. Estas pruebas son presenciales y es obligatorio realizarlas en el aula: no se tendrán en cuenta ejercicios de evaluación continua de alumnos no presentes en el aula en el momento de su realización y se penalizará del modo antes indicado (0 en la convocatoria) al alumno que pretenda resolverlas a distancia.

Observación 2. En casos justificados de tener que realizar exámenes fuera de las fechas oficiales, el tipo y estructura del examen pueden variar.

HORARIOS DE ATENCIÓN

Dr. Iñigo Navarro Blasco (inavarro@unav.es)

- Despacho 0-090 del Edificio de Investigación (Planta baja)
- Horario de tutoría: Martes, miércoles y jueves de 12:00 a 14:00 h.

Para otro tipo de consultas, contactar previamente por correo electrónico: inavarro@unav.es

BIBLIOGRAFÍA

Universidad de Navarra

Bibliografía básica recomendada

Quimiometría

- Miller, N. y Miller, J.C. Estadística y Quimiometría para Química Analítica Prentice-Hall, Madrid. 2002. Localízalo en la Biblioteca
- Ramis, G. y García, M.C. Quimiometría. Ed. Síntesis, Madrid, 2001. Localízalo en la Biblioteca

Métodos de Separación

- Skoog, D.A., Holler, F.J. y Crouch, S.R., Principles of Instrumental Analysis. Thomson Brooks, Belmont, CA., 2017. Localízalo en la Biblioteca

Métodos Cinéticos de Análisis

- Pérez Bendito, M.D., Valcárcel, M. (Eds.). Métodos Cinéticos de Análisis. Dpto. Química Analítica, Universidad de Córdoba, Caja de Ahorros y Monte de Piedad de Córdoba, 1984.
- Pérez Bendito, D., Silva, M. Kinetic Methods in Analytical Chemistry, Ellis Horwood, Chichester. 1988. Localízalo en la Biblioteca

Métodos Automatizados de Análisis

- Valcárcel, M. y Cárdenas, S., Automatización y Miniaturización en Química Analítica. Springer-Verlag Ibérica, Barcelona, 2000. Localízalo en la Biblioteca

Bibliografía de ampliación y consulta

Harvey, D. Química Analítica moderna. McGraw Hill, Madrid. 2002. Localízalo en la Biblioteca

Rubinson, K.A. y Rubinson, J.F. Análisis Instrumental. Pearson Educación. Madrid. 2001. Localízalo en la Biblioteca

Skoog, D.A. y Leary, J.J. Análisis instrumental. Ed. Mc. Graw Hill. Madrid. 1999. Localízalo en la Biblioteca

Skoog, D.A., West, D.M. y Holler, F.J. y Crouch, S.R. Fundamentos de Química Analítica. Ed. Thomson. Madrid. 2005. Localízalo en la Biblioteca

Skoog, D.A., Holler, F.J. y Crouch, S.R. . Principios de Analisis Instrumental. Ed. Cengage Learning. México. 2008. Localízalo en la Biblioteca

Fernández J.M., Navarro I., Alvarez J.I. A collection of analytical chemistry solved and explained exercises. EUNSA, Pamplona. 2020. Localízalo en la Biblioteca