



| Guía Docente          |   |                    |           |          |
|-----------------------|---|--------------------|-----------|----------|
| Datos Identificativos |   |                    | 2021/22   |          |
| Asignatura (*)        | Espectrometría de Masas Analítica de Compostos Orgánicos (en extinción)   | Código             | 610509126 |          |
| Titulación            |   |                    |           |          |
| Descritores           |   |                    |           |          |
| Ciclo                 | Período   | Curso              | Tipo      | Créditos |
| Mestrado Oficial      | Anual   | Primeiro           | Optativa  | 3        |
| Idioma                | Castelán  |                    |           |          |
| Modalidade docente    | Presencial  |                    |           |          |
| Prerrequisitos        |   |                    |           |          |
| Departamento          | Departamento profesorado másterQuímica  |                    |           |          |
| Coordinación          |   | Correo electrónico |           |          |
| Profesorado           |   | Correo electrónico |           |          |
| Web                   |   |                    |           |          |
| Descrición xeral      | Materia da Especialidade de Técnicas Analíticas Avanzadas. A espectrometría de masas é unha ferramenta indispensable en calquera laboratorio de análise química, en particular naqueles que desenvolven a súa actividade nas áreas de seguridade alimentaria, medioambiente, clínica, etc., utilizándose para a identificación e determinación cuantitativa de especies de interese. Esta materia pretende que o alumno profunde nos coñecementos das técnicas instrumentais de análise adquiridas durante o grao, e familiarícese coas tendencias recentes en relación as fontes de ionización, analizadores de masas e sistemas de extracción de información. |                    |           |          |
| Plan de continxencia  | 1. Modificacións nos contidos<br><br>2. Metodoloxías<br>*Metodoloxías docentes que se manteñen<br><br>*Metodoloxías docentes que se modifican<br><br>3. Mecanismos de atención personalizada ao alumnado<br><br>4. Modificacións na avaliación<br><br>*Observacións de avaliación:<br><br>5. Modificacións da bibliografía ou webgrafía   |                    |           |          |

| Competencias / Resultados do título |                                     |
|-------------------------------------|-------------------------------------|
| Código                              | Competencias / Resultados do título |

| Resultados da aprendizaxe   |     |                                     |     |
|---|-----|-------------------------------------|-----|
| Resultados de aprendizaxe   |     | Competencias / Resultados do título |     |
| -Adquisición dos aspectos de interese analítico sobre a Espectrometría de masas para o estudo de compostos orgánicos. | AM3 | BM2                                 | CM1 |
| -Adquisición das características e usos da dilución isotópica.  | AM6 | BM4                                 | CM3 |
| -Adquisición de aspectos relacionados con estudos de degradación e metabólica.  | AM7 | BM5                                 | CM4 |
|   | AM9 | BM7                                 |     |
|   |     | BM9                                 |     |
|   |     | BM10                                |     |
|   |     | BM11                                |     |



| Contidos  |   |
|---|---|
| Temas   | Subtemas  |
| Tema 1. INTRODUCCIÓN A LA ESPECTROMETRÍA DE MASAS ANALÍTICA.                                      | Descrición básica da instrumentación: O espectrómetro de masas. Sistemas de vacío. Etapas na xeración dun espectro de masas. Calibración de masas e axuste do espectrómetro de masas. Conceptos básicos en espectrometría de masas: Distribucións isotópicas: masas promedio e monoisotópicas. Cálculo do defecto de masas. Avaliación da exactitude e resolución: masas nominais fronte a exactas. Cargas simples e múltiples. |
| Tema 2. TÉCNICAS DE IONIZACIÓN. Fundamentos operacionais e instrumentación                        | Introdución: dependencia analito-fonte de ionización-analizador de masas. Clasificación das técnicas de ionización. Ionización Electrónica (EI). Ionización Química (CI). Selección de gases reactivos e mecanismos de ionización. Ionización a P atmosférica: ESI, APCI, APPI. Desorción Láser asistida por matriz (MALDI). Outras técnicas de ionización: DESI, DART.   |
| Tema 3. ANALIZADORES DE MASAS. Principios operacionais, instrumentación y características básicas | Principais analizadores. Cuadrupolos. Trampas de iones. Sistemas de tempo de voo (TOF). De sector magnético. Orbitrap. Analizadores en tándem. Analizadores híbridos en tándem.   |
| Tema 4. HIBRIDACIÓN CON TÉCNICAS CROMATOGRÁFICAS  | Aspectos técnicos. Obtención e tratamento de datos. Adquisición. Modos de operación. Aplicacións da hibridación GC-MS e GC-MS/MS. Aplicacións da hibridación LC-MS e LC-MS/MS. Análise cuantitativa. Dilución isotópica. Identificación de metabolitos e produtos de transformación. Deconvolución espectral.   |

| Planificación          |                                       |   |                         |              |
|------------------------|---------------------------------------|---|-------------------------|--------------|
| Metodoloxías / probas  | Competencias / Resultados             | Horas lectivas (presenciais e virtuais) | Horas traballo autónomo | Horas totais |
| Sesión maxistral       | A3 A6 A7 A9 B5 C1<br>C3 C4            | 12                                      | 36                      | 48           |
| Seminario              | A7 B2 B4 B5 B7 B9<br>B10 B11 C1 C3 C4 | 7                                       | 18                      | 25           |
| Atención personalizada |                                       | 2                                       | 0                       | 2            |

\*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

| Metodoloxías     |  |
|------------------|--|
| Metodoloxías     | Descrición   |
| Sesión maxistral | Clases presenciais teóricas. Clases expositivas (utilización de pizarra, computador, canón), complementadas coas ferramentas propias da docencia virtual.<br>Estudo persoal baseado nas diferentes fontes de información<br>Realización das diferentes probas para a verificación da obtención tanto de coñecementos teóricos como prácticos e a adquisición de habilidades e actitudes  |
| Seminario        | Seminarios realizados con profesorado propio do Máster, ou con profesionais convidados da empresa, a administración ou doutras universidades. Sesións interactivas relacionadas coas distintas materias con debates e intercambio de opinións cos alumnos.<br>Resolución de exercicios prácticos (problemas, cuestións tipo test, interpretación e procesamento da información, avaliación de publicacións científicas, etc.)<br>Realización de traballos, tanto individualmente, como en grupo, sobre contidos da materia<br>Exposición oral de traballos, informes, etc., incluíndo debate con profesores e alumnos. |

| Atención personalizada |            |
|------------------------|------------|
| Metodoloxías           | Descrición |
|                        |            |



|           |  |
|-----------|--|
| Seminario | Tutorías individuales o en grupo reducido. |
|-----------|--|

| Avaliación       |                                       |  |               |
|------------------|---------------------------------------|--|---------------|
| Metodoloxías     | Competencias / Resultados             | Descrición   | Cualificación |
| Seminario        | A7 B2 B4 B5 B7 B9<br>B10 B11 C1 C3 C4 | Resolución de problemas e casos prácticos<br>Realización de traballos e informes escritos<br>Avaliación continua durante o curso | 25            |
| Sesión maxistral | A3 A6 A7 A9 B5 C1<br>C3 C4            | Examen final   | 75            |

| Observacións avaliación |
|-------------------------|
|                         |

| Fontes de información              |  |
|------------------------------------|--|
| <b>Bibliografía básica</b>         | Bibliografía recomendada Básica (manuais de referencia) C. Dass, Fundamentals of Contemporary Mass Spectrometry, Wiley, 2007 R. M. Smith, K.L. Busch, Understanding Mass Spectra- A basic Approach, John Wiley & Sons, 1999. R.K. Boyd, C. Basic, R.A. Behen, Trace Quantitative Analysis by Mass Spectrometry, John Wiley and Sons, 2008 Complementaria E. de Hoffmann, V. Stroobant, Mass Spectrometry: Principles and Applications, 3a ed., Wiley, 2007 A. E. Ashcroft, Ionization Methods in Organic Mass Spectrometry, Royal Society of Chemistry, 1997 J. H. Gross, Mass Spectrometry: a textbook, Springer, 2005 K. Downard, Mass Spectrometry: a Foundation Course, RSC, 2004 B. Ardrey, Liquid Chromatography-Mass spectrometry: an introduction, Wiley, 2003 R. Willoughby, E. Sheehan, S. Mitrovich, A global view of LC/MS, Global View Publishing, 2nd edition, 2002 M. C. McMaster, GC/MS, A Practical User's Guide, John Wiley & Sons, 2008 W.M.A. Niessen, Liquid Chromatography-Mass spectrometry, Taylor and Francis, 2007 |
| <b>Bibliografía complementaria</b> |  |

| Recomendacións  |
|---|
| <b>Materias que se recomenda ter cursado previamente</b>  |
|   |
| <b>Materias que se recomenda cursar simultaneamente</b>   |
| Técnicas de Preparación da Mostra /610509128<br>Cromatografía e Técnicas Analíticas de Separación/610509125   |
| <b>Materias que continúan o temario</b>   |
|   |
| <b>Observacións</b>   |
| Especialidade de Técnicas Analíticas Avanzadas. Os únicos coñecementos obrigatorios son aqueles que se establecen como requisitos básicos para acceder a este Máster. É recomendable dispoñer de nocións básicas sobre Espectrometría de Masas, adquiridas nas diferentes materias que dan acceso ao presente Máster. Recoméndase cursar tamén a Materia de "Cromatografía e Técnicas Analíticas de Separación" |

(\*A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías