



| Guía Docente          |   |                    |           |          |
|-----------------------|---|--------------------|-----------|----------|
| Datos Identificativos |   |                    |           | 2021/22  |
| Asignatura (*)        | Espectrometría de Masas Analítica de Compostos Orgánicos (en extinción)   | Código             | 610509126 |          |
| Titulación            | Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2020)  |                    |           |          |
| Descriptorios         |   |                    |           |          |
| 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  |
| A3                                  | CE4 - Innovar en métodos de síntese e análise química relacionados coas diferentes áreas da Química.   |
| A6                                  | CE6 - Diseñar procesos que impliquen o tratamento ou eliminación de produtos químicos perigosos  |
| A7                                  | CE7 - Operar con instrumentación avanzada para análise química e a determinación estrutural  |
| A9                                  | CE9 - Valorar, promover e practicar a innovación e o emprendemento na industria e na investigación química.  |
| B2                                  | CB7 - Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornos novos ou pouco coñecidos dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo. |
| B4                                  | CB9 - Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan a públicos especializados e non especializados dun modo claro e sen ambigüedades.   |
| B5                                  | CB10 - Que os estudantes posúan as habilidades de aprendizaxe que lles permitan continuar estudando dun modo que habrá de ser en gran medida autodirixido ou autónomo.   |



|     |  |
|-----|--|
| B7  | CG2 - Identificar información da literatura utilizando as canles axeitadas e integrar esta información para crear e contextualizar un tema de investigación. |
| B9  | CG4 - Demostrar capacidade de analizar, describir, organizar, planificar e xestionar proxectos   |
| B10 | CG5 - Usar a terminoloxía científica en inglés para discutir os resultados experimentais no contexto da profesión química                                    |
| B11 | CG6 - Aplicar correctamente as novas tecnoloxías de capturar e organizar a información para resolver problemas na actividade profesional                     |
| C1  | CT1 - Elaborar, escribir e defender publicamente informes de carácter científico e técnico   |
| C3  | CT3 - Traballar con autonomía e eficiencia na práctica diaria da investigación ou da actividade profesional.   |
| C4  | CT4 - Apreciar o valor da calidade e mellora continua, actuando con rigor, responsabilidade e ética profesional.   |

| 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 metabolómica.                                      |  | 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 | <p>Clases presenciais teóricas. Clases expositivas (utilización de pizarra, computador, canón), complementadas coas ferramentas propias da docencia virtual.</p> <p>Estudo persoal baseado nas diferentes fontes de información</p> <p>Realización das diferentes probas para a verificación da obtención tanto de coñecementos teóricos como prácticos e a adquisición de habilidades e actitudes</p>  |
| Seminario        | <p>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.</p> <p>Resolución de exercicios prácticos (problemas, cuestións tipo test, interpretación e procesamento da información, avaliación de publicacións científicas, etc.)</p> <p>Realización de traballos, tanto individualmente, como en grupo, sobre contidos da materia</p> <p>Exposición oral de traballos, informes, etc., incluíndo debate con profesores e alumnos.</p> |

| Atención personalizada |   |
|------------------------|---|
| Metodoloxías           | Descrición                                |
| Seminario              | Tutorías individuais o en grupo reducido. |

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

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

| Fontes de información              |   |
|------------------------------------|---|
| <b>Bibliografía básica</b>         | <p>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 &amp; 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 &amp; Sons, 2008 W.M.A. Niessen, Liquid Chromatography-Mass spectrometry, Taylor and Francis, 2007</p> |
| <b>Bibliografía complementaria</b> |   |

| Recomendacións                                    |
|---|
| Materias que se recomenda ter cursado previamente |



|   |
|---|
|   |
| <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