



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 2. Metodoloxías *Metodoloxías docentes que se manteñen *Metodoloxías docentes que se modifican 3. Mecanismos de atención personalizada ao alumnado 4. Modificacións na avaliación *Observacións de avaliación: 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 C3 C4 | 12 | 36 | 48 |
| Seminario | A7 B2 B4 B5 B7 B9 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. Estudo persoal baseado nas diferentes fontes de información 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. Resolución de exercicios prácticos (problemas, cuestións tipo test, interpretación e procesamento da información, avaliación de publicacións científicas, etc.) Realización de traballos, tanto individualmente, como en grupo, sobre contidos da materia Exposición oral de traballos, informes, etc., incluíndo debate con profesores e alumnos. |

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

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

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

| Fontes de información | |
|------------------------------------|--|
| Bibliografía básica | 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 |
| Bibliografía complementaria | |

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



| |
|---|
| |
| Materias que se recomenda cursar simultaneamente |
| Técnicas de Preparación da Mostra /610509128 Cromatografía e Técnicas Analíticas de Separación/610509125 |
| Materias que continúan o temario |
| |
| Observacións |
| 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