



Guia docente				
Datos Identificativos				2019/20
Asignatura (*)	Espectrometría de Masas Analítica de Compuestos Orgánicos		Código	610509126
Titulación	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2017)			
Descriptores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	Anual	Primero	Optativa	3
Idioma	Castellano			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Departamento profesorado másterQuímica			
Coordinador/a	Muniategui Lorenzo, Soledad	Correo electrónico	soledad.muniategui@udc.es	
Profesorado	Muniategui Lorenzo, Soledad Ramil Criado, María Rodríguez Pereiro, Isaac	Correo electrónico	soledad.muniategui@udc.es	
Web				
Descripción general	Materia de la Especialidad de Técnicas Analíticas Avanzadas. La espectrometría de masas es una herramienta indispensable en cualquier laboratorio de análisis químico, en particular en aquellos que desarrollan su actividad en las áreas de seguridad alimentaria, medioambiente, clínica, etc., utilizándose para la identificación y determinación cuantitativa de especies de interés. Esta materia pretende que el alumno profundice en los conocimientos de las técnicas instrumentales de análisis adquiridas durante el grado, y se familiarice con las tendencias recientes en relación a fuentes de ionización, analizadores de masas y sistemas de extracción de información.			

Competencias del título	
Código	Competencias del título
A3	CE4 - Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
A6	CE6 - Diseñar procesos que impliquen el tratamiento o eliminación de productos químicos peligrosos
A7	CE7 - Operar con instrumentación avanzada para el análisis químico y la determinación estructural
A9	CE9 - Valorar, promover y practicar la innovación y el emprendimiento en la industria y en la investigación química.
B2	CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
B4	CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
B5	CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
B7	CG2 - Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación
B9	CG4 - Demostrar habilidad de analizar, describir, organizar, planificar y gestionar proyectos
B10	CG5 - Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
B11	CG6 - Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional
C1	CT1 - Elaborar, escribir y defender públicamente informes de carácter científico y técnico.
C3	CT3 - Trabajar con autonomía y eficiencia en la práctica diaria de la investigación o de la actividad profesional.
C4	CT4 - Aprender el valor de la calidad y la mejora continua, actuando con rigor, responsabilidad y ética profesional.

Resultados de aprendizaje	
Resultados de aprendizaje	Competencias del título



-Adquisición de los aspectos de interés analítico sobre la Espectrometría de masas para el estudio de compuestos orgánicos.	AM3	BM2	CM1
-Adquisición de las características y usos de la dilución isotópica.	AM6	BM4	CM3
-Adquisición de aspectos relacionados con estudios de degradación y metabolómica.	AM7	BM5	CM4
	AM9	BM7	
		BM9	
		BM10	
		BM11	

Contenidos	
Tema	Subtema
Tema 1. INTRODUCCIÓN A LA ESPECTROMETRÍA DE MASAS ANALÍTICA.	Descripción básica de la instrumentación: El espectrómetro de masas. Sistemas de vacío. Etapas en la generación de un espectro de masas. Calibración de masas y ajuste del espectrómetro de masas. Conceptos básicos en espectrometría de masas: Distribuciones isotópicas: masas promedio y monoisotópicas. Cálculo del defecto de masas. Evaluación de exactitud y resolución: masas nominales frente a exactas. Cargas simples y múltiples.
Tema 2. TÉCNICAS DE IONIZACIÓN. Fundamentos operaciones e instrumentación	Introducción: dependencia analito-fuente de ionización-analizador de masas. Clasificación de las técnicas de ionización. Ionización Electrónica (EI). Ionización Química (CI). Selección de gases reactivos y mecanismos de ionización. Ionización a P atmosférica: ESI, APCI, APPI. Desorción Láser asistida por matriz (MALDI). Otras técnicas de ionización: DESI, DART.
Tema 3. ANALIZADORES DE MASAS. Principios operacionales, instrumentación y características básicas	Principales analizadores. Cuadrapolos. Trampas de iones. Sistemas de tiempo de vuelo (TOF). De sector magnético. Orbitrap. Analizadores en tándem. Analizadores híbridos en tándem.
Tema 4. HIBRIDACIÓN CON TÉCNICAS CROMATOGRÁFICAS	Aspectos técnicos. Obtención y tratamiento de datos. Adquisición. Modos de operación. Aplicaciones de la hibridación GC-MS y GC-MS/MS. Aplicaciones de la hibridación LC-MS y LC-MS/MS. Análisis cuantitativo. Dilución isotópica. Identificación de metabolitos y productos de transformación. Deconvolución espectral. Inserir

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	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
(*)Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	Descripción
Sesión magistral	Clases presenciales teóricas. Clases expositivas (utilización de pizarra, ordenador, cañón), complementadas con las herramientas propias de la docencia virtual. Estudio personal basado en las diferentes fuentes de información Realización de las diferentes pruebas para la verificación de la obtención tanto de conocimientos teóricos como prácticos y la adquisición de habilidades y actitudes



Seminario	Seminarios realizados con profesorado propio del Máster, o con profesionales invitados de la empresa, la administración o de otras universidades. Sesiones interactivas relacionadas con las distintas materias con debates e intercambio de opiniones con los alumnos. Resolución de ejercicios prácticos (problemas, cuestiones tipo test, interpretación y procesamiento de la información, evaluación de publicaciones científicas, etc.) Realización de trabajos, tanto individualmente, como en grupo, sobre contenidos de la materia Exposición oral de trabajos, informes, etc., incluyendo debate con profesores y alumnos.
-----------	--

Atención personalizada	
Metodologías	Descripción
Seminario	Tutorías individuales o en grupo reducido.

Evaluación			
Metodologías	Competencias	Descripción	Calificación
Seminario	A7 B2 B4 B5 B7 B9 B10 B11 C1 C3 C4	Resolución de problemas y casos prácticos Realización de trabajos e informes escritos Evaluación continua durante el curso	25
Sesión magistral	A3 A6 A7 A9 B5 C1 C3 C4	Examen final	75

Observaciones evaluación
Competencias evaluadas CE4, CE6,CE9, CE7

Fuentes de información	
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
Complementaria	

Recomendaciones
Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente
Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente
Técnicas de Preparación de la Muestra/610509128 Cromatografía y Técnicas Analíticas de Separación/610509125
Asignaturas que continúan el temario
Otros comentarios



Especialidad de Técnicas Analíticas Avanzadas. Los únicos conocimientos obligatorios son aquellos que se establecen como requisitos básicos para acceder a este Máster. Es recomendable disponer de nociones básicas sobre Espectrometría de Masas, adquiridas en las diferentes asignaturas que dan acceso al presente Máster. Se recomienda cursar también la Materia de ?Cromatografía e Técnicas Analíticas de Separación?

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías