



Guía 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)			
Descriptor				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	Anual	Primeiro	Optativa	3
Idioma	Castelán			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Departamento profesorado másterQuímica			
Coordinación	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				
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.			

Competencias do título	
Código	Competencias 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 haberá 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 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. Cuadрупolos. 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	Horas presenciais	Horas non presenciais / 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. Sesiões 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	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