



GUÍA DOCENTE 2016-2017
**TÉCNICAS AVANZADAS I. TÉCNICAS DE RAYOS X Y
ESPECTROMETRÍA DE MASAS.**

1. Denominación de la asignatura:

TÉCNICAS AVANZADAS I. TÉCNICAS DE RAYOS X Y ESPECTROMETRÍA DE MASAS.

Titulación

Máster Universitario en Química Avanzada

Código

7467

2. Materia o módulo a la que pertenece la asignatura:

NUEVOS MATERIALES Y PRODUCTOS Y PROCEDIMIENTOS INDUSTRIALES

3. Departamento(s) responsable(s) de la asignatura:

QUÍMICA

4.a Profesor que imparte la docencia (Si fuese impartida por mas de uno/a incluir todos/as) :

ARANZAZU MENDÍA JALÓN, ROBERTO QUESADA PATO, GOTZON MADARIAGA, MANUEL ÁNGEL FERNÁNDEZ RODRÍGUEZ, MARIANO LAGUNA CASTRILLO

4.b Coordinador de la asignatura

Aránzazu Mendía Jalón

5. Tipo de la asignatura: (Básica, obligatoria u optativa)

Optativa



6. Número de créditos ECTS de la asignatura:

5 (CUATRIMESTRAL, PRIMER TRIMESTRE)

7. Competencias que debe adquirir el alumno/a al cursar la asignatura

COMPETENCIAS BÁSICAS Y GENERALES

BÁSICAS

CB6.- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación

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

CB8.- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios

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

GENERALES

CG5.- Tener habilidades en las relaciones interpersonales, demostrando iniciativa, liderazgo y motivación por la calidad, de modo que pueda desarrollar trabajos en equipo

CG6.- Poseer la capacidad de gestionar, evaluar, interpretar, sintetizar y transmitir adecuadamente la información relativa al ámbito de estudio

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE1.- Haber adquirido conocimientos avanzados de Química demostrando, en un contexto altamente especializado, una comprensión detallada y fundamentada de los aspectos teóricos y prácticos y de la metodología de trabajo en Química.

CE3.- Poseer habilidades que permitan interpretar y usar la información química proporcionada por las técnicas instrumentales más avanzadas para resolver problemas en el ámbito industrial, en la regulación legal y/o en el estudio de nuevos materiales.

CE5.- Tener la capacidad para proyectar y optimizar experimentos, disminuyendo costes y tiempo, manteniendo la calidad de la información, el respeto al medio ambiente y a las normativas de calidad y seguridad.

CE6.- Haber desarrollado la autonomía suficiente para participar en proyectos



relacionados con la Química, en contextos interdisciplinares y, en su caso, con una alta componente de transferencia del conocimiento

CE7.- Poseer habilidades en el manejo de herramientas informáticas avanzadas que se utilizan en el ámbito de la Química.

8. Programa de la asignatura

8.1- Objetivos docentes
OBJETIVOS GENERALES OG1. Reconocer la función de los distintos elementos de un espectrómetro de Masas. OG2. Aplicar la técnica de Espectrometría de Masas al estudio un material. OG3. Interpretar la información obtenida por EM. OG4. Valorar la aplicación de la difracción de rayos X en el área del análisis estructural de compuestos sólidos. OBJETIVOS ESPECÍFICOS OE1. Aplicar la EM al estudio estructural de diferentes tipos de compuestos orgánicos e inorgánicos. OE2. Realizar experimentos de difracción de Rayos X para obtener información estructural sobre sólidos cristalinos y amorfos.
8.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)
Unidad 1. ESPECTROMETRÍA DE MASAS (EM): INSTRUMENTACIÓN Y TÉCNICAS Tema 1 Instrumentación: El espectrómetro de masas. - Los elementos de un espectrómetro de masas y su función. - Proceso de introducción de la muestra. - Métodos de generación de iones: Ionización electrónica(EI), Ionización química (CI), Ionización de campo (FI), métodos de Desorción/Ionización (FD, SIMS, FAB, LSIMS, MALDI) Tema 2 Fuentes de ionización, sistemas analizadores de iones y detectores. - Cámara de ionización. - Analizadores magnéticos y electromagnéticos, cuadrupolares y de tiempo de vuelo. - Sistemas de detección de iones. Tema 3 Espectrometría de Masas MS/MS y técnicas acopladas - Espectrometría de Masas MS/MS (Tandem Mass Spectrometry) - Acoplamiento Cromatografía/Espectrometría de Masas (GC/MS y HPLC/MS) - Acoplamiento Electroforesis capilar/Espectrometría de Masas (CE/MS)



Unidad 2. APLICACIONES DE LA EM EN LA DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS

Tema 4

Aplicaciones de la EM en Química Orgánica y en Química Inorgánica.

- El ión molecular: Señales isotópicas y fórmula molecular.
- Modelos de fragmentación molecular e interpretación de los espectros de Masas.
- Ejemplos de aplicación de la EM en la elucidación estructural de compuestos orgánicos.
- Ejemplos de aplicación de la EM en el área de Química Inorgánica.

Tema 5

Aplicación de la EM en otros campos de la ciencia.

- EM de polímeros y biopolímeros.
- Aplicaciones específicas de la EM en Química Inorgánica.

Unidad 3. CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X

Tema 6

Cristalografía.

- Conceptos básicos: Redes, planos, índices, simetría. Grupos puntuales y espaciales.
- Fenómenos de dispersión: Aspectos físicos y geométricos de la difracción.

Tema 7

Generación de rayos X y su difracción.

- Tubos convencionales, ánodos rotatorios y sincrotrón.
- El factor de estructura. Simetría de la difracción. Extinciones sistemáticas.
- Goniómetros y detectores. Medida de intensidades. Análisis del espectro.

Tema 8

Resolución de estructuras tridimensionales.

- Métodos de asignación de fases.
- Determinación de estructuras por métodos vectoriales y directos.
- Uso de bases de datos estructurales.
- Cristalografía para macromoléculas biológicas. Bases de datos estructurales.

8.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- C. Giacovazzo et al., (2002) Fundamentals of Crystallography, 2nd, Oxford Science Publications , Oxford,
- Cristopher Hammond, (1997) The Basics of Crystallography and Diffraction, Oxford University Press, Oxford,
- Crystal Structure Analysis: A primer., (1985) J. Pickworth Glusker, K.N. Trueblood. , Oxford University Press,
- D.H. Russel,, (1994) Experimental Mass Spectrometry, Plenum Press, New York,
- E. Hoffmann and V. Stroobant, (2003) Mass Spectrometry. Principles and Applications, Second Edition, Wiley, New York, 0 47148565,
- F. Adams, R. Gijbels and R. van Grieken, (1988) Inorganic Mass Spectrometry, Wiley,



New York ,
F. W. McLafferty, F. Turecek, Interpretation of Mass Spectra, 5th Edition, University Science Books, Sausalito, California,
F.W. McLafferty, (1983) Tandem Mass Spectrometry, Wiley,
G. H. Stout, L. H. Jensen, X-Ray Structure Determination. a practical Guide, 1989, Wiley,
G. Harbour, C.A. Taylor, T.R. Welberry, Atlas of Optical Transforms. Bell, London, Bell, London,
G. Montaudo, R. Lattimer, (2001) Mass Spectrometry of Polymers, CRC Press, New York, 0 8493 3127 7,
G.H. Stout, L.H. Jensen, (1989) X-ray structure determination: a practical guide, The Macmillan Company,
J. A. Hermoso, M. Martínez-Ripoll, M., (2003) Estructura de proteínas por Cristalografía de Rayos X, Ariel Ciencia, Madrid,
Jenny P. Glusker, Mitchell Lewis, Miriam Rossi., (1994) Crystal Structure Analysis for Chemists and Biologists, VCH, New York,
L. Esteban, (1993) La espectrometría de masas en imágenes, ACR, New York,
L.V. Azaroff, (1968) Elements of X-ray Crystallography, McGraw-Hill Book,
M. Hesse, H Meier, B. Zeeh, (1995) Métodos espectroscópicos en Química Organica, Editorial Síntesis, Madrid, 84 7738 522 X, www.sintesis.com.
M. M. Woolfson, (1997) X-Ray Crystallography, Cambridge University Press,
R. M. Silverstein, F. X. Webster; D.J. Kiemle, (2005) Spectrometric Identification of Organic Compounds, 7ª, Wiley, 9780471393627, www.wiley.com/college.
R. Martin Smith, (2005) Understanding Mass Spectra, 2nd Ed, Wiley, New Jersey, 0 471 42949 X,
William Clegg, (1998) Crystal Structure Determination, Oxford University Press,, Oxford,

9. Metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante:

Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
Unidad 1 (Clases)	CB6,CB7,CB8,CB9, CG5,CG6,CE1, CE3	12	24	36
Unidad 2 (Clases)	CB6,CB7,CB8,CB9, CG5,CG6,CE1, CE3	12	24	36
Unidad 3 (Clases)	CB6,CB7,CB8,CB9, CG5,CG6,CE1, CE3	8	14	22
Tutorías, seminarios científicos, visita fábricas/laboratorios, etc.	CB8, CB9, CG5, CG6, CE1, CE5, CE6, CE7	9	4	13



Elaboración y exposición de trabajos e informes	CB9, CG5, CG6, CE5, CE6	2	8	10
Pruebas de evaluación escritas	CB6, CB7, CB8, CG6, CE1, CE3, CE5, CE7	2	6	8
Total		45	80	125

10. Sistemas de evaluación:

En segunda Convocatoria serán recuperables cada una de las partes contempladas en el procedimiento de evaluación, según la ponderación especificada para cada una de ellas.

Procedimiento	Peso primera convocatoria	Peso segunda convocatoria
Participación en la realización de actividades presenciales en clases, seminarios y tutorías.	20 %	20 %
Entregas correspondientes a resolución de cuestionarios y/o ejercicios prácticos.	30 %	30 %
Elaboración y presentación de trabajos individuales.	20 %	20 %
Pruebas escritas de carácter individual.	30 %	30 %
Total	100 %	100 %

Evaluación excepcional:

En atención al reglamento vigente en la UBU se considerará la excepcionalidad para aquellos casos que se ajusten al mencionado reglamento y se propone un sistema de evaluación, también ajustado a él, que incluye el siguiente procedimiento para evaluar de igual manera los resultados de aprendizaje:

- Examen escrito que aborda cualquiera de los contenidos incluidos en la guía docente de la asignatura, con un peso del 40 %. Se deberá obtener un 5/10 en esta prueba de evaluación para realizar la media correspondiente con la calificación obtenida en los otros procedimientos de evaluación.
- Elaboración y presentación oral de un trabajo individual inédito sobre la utilización de la EM y la DRX en la caracterización de compuestos orgánicos e inorgánicos concretos, basado en la literatura y referencias bibliográficas existentes, con un peso del 40%.
- Evaluación de una serie de cuestionarios —similares a los que realizan los estudiantes en el Sistema de Evaluación Ordinario— adecuadamente resueltos y



entregados en el momento de realizar la prueba escrita, con un peso del 20%.

11. Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial:

Plataforma Ubu Virtual

12. Calendarios y horarios:

Calendario 2016-2017 y Horarios 2016-2017 se encuentran públicos en la web del Título

13. Idioma en que se imparte:

Español