



GUÍA DOCENTE 2012-2013
**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.

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) :

JOSÉ LUIS DE LA PEÑA ALBILLOS, ARANZAZU MENDÍA JALÓN,
MARIANO LAGUNA CASTRILLO Y MARTÍN MARTINEZ RIPOLL

4.b Coordinador de la asignatura

JOSÉ LUIS DE LA PEÑA ALBILLOS

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

Optativa

6. Requisitos de formación previos para cursar la asignatura:

Licenciatura en Química, Farmacia, Física, Biología, Bioquímica o Ciencia y



7. Número de créditos ECTS de la asignatura:

5 (CUATRIMESTRAL, PRIMER TRIMESTRE)

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

COMPETENCIAS GENÉRICAS

- G1. Utilizar el aprendizaje autónomo para la formación continua y el desarrollo profesional.
- G2. Conocer y manejar las fuentes de información para la elaboración de informes.
- G3. Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica profesional o a la investigación.
- G4. Planificar un trabajo y su realización, individualmente o en grupo.
- G5. Generar iniciativas para resolver problemas derivados de la actividad profesional.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- E1. Identificar los elementos de un espectrómetro de Masas y utilizar las técnicas de EM apropiadas para el estudio de diferentes tipos de materiales.
- E2. Interpretar los EM registrados y comparar (o complementar) la información obtenida con los datos disponibles de otras técnicas.
- E3. Planificar experimentos químicos habituales y de la información obtenida por EM- de la estructura de los compuestos resultantes, de los mecanismos de reacción y/o de los procesos inter- e intramoleculares que tienen lugar- diseñar la estrategia para la síntesis de nuevos compuestos.
- E4. Reconocer la importancia de la cristalografía estructural y su complementariedad con otras técnicas espectroscópicas.
- E5. Resolver la estructura de un compuesto mediante datos difractométricos de monocristal y polvo.
- E6. Modificar el experimento de difracción realizado, en base a los resultados obtenidos, para ampliar la información disponible.
- E7. Diferenciar y valorar las ventajas de la difracción en polvo y de la fluorescencia de rayos-X en sólidos cristalinos y amorfos.



9. Programa de la asignatura

9.1- 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.
9.2- 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.



9.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- C. Giacobazzo 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 Crystallograph, 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,

10. 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)	G1-G2 / E1-E2	12	24	36
Unidad 2 (Clases)	G1-G2 / E1-E3	12	24	36
Unidad 3 (Clases)	G1-G2/ E4-E7	8	14	22
Tutorías, seminarios científicos, visita fábricas/laboratorios, etc.	G3-G4 / E4-E7	9	4	13
Elaboración y exposición de trabajos e informes	G3-G5 / E1-E7	2	8	10
Pruebas de evaluación escritas	G1-G5 / E1-E7	2	6	8
Total		45	80	125

11. Sistemas de evaluación:

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



Evaluación excepcional, si procede:

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.

12. Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial:

Plataforma Ubu Virtual

13. Calendarios y horarios:

Calendario 2011-2012
Horarios 2011-2012

14. Idioma en que se imparte:

Español/Inglés