



1821 Universidad de Buenos Aires

Resolución Consejo Directivo

Número: RESCD-2024-1994-E-UBA-DCT#FCEN

CIUDAD DE BUENOS AIRES

Viernes 15 de Noviembre de 2024

Referencia: EX-2022-07085843- -UBA-DMESA#FCEN - POSTGRADO - Sesión
11/11/2024

VISTO:

La nota presentada por la Dirección del Departamento de Biodiversidad y Biología Experimental, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado **Cromatografía Líquida de Alta Resolución Acoplada a Espectrometría de Masa (HPLC-MS) (DOC8801165)** para el año 2025,

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado,

lo actuado por la Comisión de Presupuesto y Administración,

lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada el día 11 de noviembre de 2024,

en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo 113° del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD

DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

RESUELVE:

ARTÍCULO 1º: Aprobar el dictado del curso de posgrado **Cromatografía Líquida de Alta Resolución Acoplada a Espectrometría de Masa (HPLC-MS) (DOC8801165)** de 64 horas de duración, que será dictado por la Dra. Gabriela Cabrera con la colaboración de la Dra. Evelyn Bonifazi.

ARTÍCULO 2º: Aprobar el programa del curso de posgrado **Cromatografía Líquida de Alta Resolución Acoplada a Espectrometría de Masa (HPLC-MS) (DOC8801165)** que como anexo forma parte de la presente Resolución, para su dictado en el segundo bimestre de 2025.

ARTÍCULO 3º: Aprobar un puntaje máximo de tres (3) puntos para la Carrera de Doctorado.

ARTÍCULO 4º: Establecer un arancel de **CATEGORÍA BAJA**.

ARTÍCULO 5º: Disponer que, de no mediar modificaciones en el programa, la carga horaria y el arancel, el presente Curso de Posgrado tendrá una vigencia de cinco (5) años a partir de la fecha de la presente Resolución.

ARTÍCULO 6º: Comuníquese a todos los Departamentos Docentes, a la Dirección de Estudiantes y Graduados, a la Dirección de Movimiento de Fondos, a la Dirección de Presupuesto y Contabilidad, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Secretaría de Posgrado con copia del programa incluida. Cumplido, pase a QORGANICA#FCEN y resérvese.

ANEXO

PROGRAMA

Objetivos

El objetivo del curso es brindar conocimientos de Espectrometría de Masa, partiendo de conceptos básicos como el funcionamiento de un instrumento y la interpretación de un espectro de masa y masa/masa hasta la comprensión de todas las variantes instrumentales actuales, analizadas con los detalles pertinentes.

Se desarrollan en el curso todos los mecanismos implicados tanto en la ionización de las moléculas en cada método particular como también en la fragmentación. Se brindan también las capacidades mínimas necesarias como para desarrollar técnicas de laboratorio, interpretar los procesos de operación de los equipos y hacer el análisis e interpretación de los resultados.

Se proporcionan también los usos de la Espectrometría de Masa en sus diversas aplicaciones en todas las ramas de la Química y la Biología, sus alcances y limitaciones.

Se agrega además al curso previamente dictado en 2023, el procesamiento de espectros a partir de archivos crudos proporcionados, para que cualquier persona que realice el curso pueda obtener sus propios resultados sin necesidad de intermediarios, a partir de un servicio. Esto es particularmente importante ya que no hay tantos equipos en el país y los servicios son muy costosos si deben incluir la obtención de los datos e interpretación de las corridas cromatográficas.

Actividades prácticas propuestas

En las clases de problemas se resolverán situaciones concretas que requieren de la interpretación de espectros para elucidar estructuras o elegir o diseñar métodos de análisis adecuados.

Se realizarán en el laboratorio experimentos para la determinación de fórmulas moleculares con diferentes técnicas de ionización, y espectros de masa-masa en un equipo de HPLC-MS de alta resolución.

Se realizará el análisis por HPLC-MS de una muestra que contiene o un principio activo de una droga avejentada, determinándose las estructuras de las impurezas, artefactos y productos de descomposición o una droga adulterada para determinar la identidad de la adulteración. La práctica incluirá el procesado de las corridas cromatográficas, espectros y elucidación estructural de los analitos.

Se requiere para la aprobación del curso, de la presentación de un seminario sobre un artículo científico publicado en el último año en alguna revista de la especialidad.

Programa

FUNDAMENTOS.

Introducción. El espectrómetro de masa: introducción de muestra vía HPLC, fuente de ionización, analizador, óptica iónica, bombas de vacío y detectores.

MÉTODOS DE IONIZACIÓN.

Métodos de ionización a presión atmosférica: Electrospray (ESI), Ionización Química a presión atmosférica (APCI), Fotoionización a presión atmosférica (APPI).

ANALIZADORES

Características de un analizador: Resolución, Sensibilidad, Precisión, Rango de masas. Barridos. Descripciones y fundamentos teóricos de los analizadores: Cuadrupolo (Q), Trampas iónicas (QIT, LIT), Orbitrap, Resonancia iónica ciclotrónica con transformada de Fourier (FTICR), Tiempo de vuelo (TOF). Ventajas, desventajas y usos de cada tipo de analizador.

ESPECTROMETRÍA DE MASA TÁNDEM

Fundamentos de la Espectrometría de Masa en Tándem. Tándem en el espacio y tándem en el tiempo, MS_n. Instrumentación: Triple cuadrupolo (QqQ): barridos de iones precursores, productos y pérdidas neutras, monitoreo selectivo de reacciones. Instrumentos híbridos: Cuadrupolo- Tiempo de vuelo. Cuadrupolo-Trampa de iones lineal, Cuadrupolo/Trampa de iones-Orbitrap. Alcances y limitaciones de cada uno de ellos.

Movilidad Iónica-Espectrometría de Masa.

FRAGMENTACIONES

Métodos de fragmentación. Disociaciones inducidas por colisión (CID) de baja energía. Disociaciones inducidas por colisión dentro de la fuente de ionización. Mecanismos de fragmentación en CID de baja energía.

APLICACIONES

Supresión e incremento iónico. Cuantificación por espectrometría de masa. Análisis elemental. Uso de abundancias isotópicas. Aplicaciones en Química Medicinal, Química de Alimentos, Medicina Clínica y Química Forense. Aplicaciones a la determinación de contaminantes, adulterantes, impurezas, toxinas. Aplicaciones a la elucidación estructural de productos naturales. Aplicaciones en Metabolómica.

Procesamiento de cromatogramas y espectros a partir de archivos crudos que se proveerán, empleando software accesible.

Bibliografía

- Mass Spectrometry. Principles and Applications. E. De Hoffmann, J. Charette, V. Stroobant. Wiley. 2007.
- Mass Spectrometry. J. H. Gross. Springer. 2011.
- Mass Spectrometry: Instrumentation, Interpretation, and Applications. Ed. R. Ekman, J. Silberring, A. Westman-Brinkmalm, A. Wiley. 2009.
- Electrospray and MALDI Mass Spectrometry. Fundamentals, Instrumentation, Practicalities, and Biological Applications. Ed. R. B. Cole. Wiley 2010.
- Applied Electrospray Mass Spectrometry. B. N. Pramanik, A. K. Ganguly, M. L. Gross Ed. Marcel Dekker 2002.
- Revistas de la especialidad: Mass Spectrometry Reviews, Journal of the American Society for Mass Spectrometry, Journal of Mass Spectrometry, Rapid Communications in Mass Spectrometry, International Journal of Mass Spectrometry

Digitally signed by MARTI Marcelo Adrian
Date: 2024.11.15 13:37:31 ART
Location: Ciudad Autónoma de Buenos Aires

Marcelo Marti
Secretario
Secretaría de Posgrado
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Digitally signed by DURAN Guillermo Alfredo
Date: 2024.11.15 14:45:06 ART
Location: Ciudad Autónoma de Buenos Aires

Guillermo Alfredo Duran
Decano
Decanato
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales