



1821 Universidad de Buenos Aires

Resolución Consejo Directivo

Número:

Referencia: EX-2023-07376948- -UBA-DMESA#FCEN - POSTGRADO - Sesión
29/09/2025

VISTO:

La nota presentada por la Dirección del Departamento de Química Orgánica, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado **Espectrometría de Masa en Química Orgánica. Fundamentos y Aplicaciones (DOC8800940)** para el año 2026,

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado,

lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada el día 29 de septiembre de 2025,

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 1°: Aprobar el dictado del curso de posgrado **Espectrometría de Masa en Química Orgánica. Fundamentos y Aplicaciones (DOC8800940)** de 80 horas y 8 semanas de duración, que será dictado por la Dra. Gabriela M. Cabrera, con la colaboración de la Dra. Evelyn Bonifazi.

ARTÍCULO 2°: Aprobar el programa del curso de posgrado **Espectrometría de Masa en Química Orgánica. Fundamentos y Aplicaciones (DOC8800940)** que como anexo forma parte de la presente Resolución, para su dictado en el segundo bimestre de 2026.

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

ARTÍCULO 4°: Establecer un arancel de **CATEGORÍA BAJA**, estableciendo que dicho arancel estará sujeto a los descuentos y exenciones estipulados mediante la Resolución CD N.º 1072/19. Disponer que los fondos recaudados ingresen en la cuenta presupuestaria habilitada para tal fin, y sean utilizados de acuerdo a la Resolución 072/0.

ARTÍCULO 5°: 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 6°: Comuníquese a todos los Departamentos Docentes, a la Dirección de Estudiantes y Graduados, 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

Espectrometría de Masa en Química Orgánica. Fundamentos y Aplicaciones

PROGRAMA

Objetivos:

El objetivo del curso es que los estudiantes aprendan Espectrometría de Masa en su estado actual, incluyendo todas las variantes y aplicaciones relacionadas con la detección, caracterización, identificación y cuantificación de moléculas orgánicas y organometálicas. El objetivo también es que puedan interpretar y procesar espectros de masa, de modo de poder utilizar los archivos de los espectros y cromatogramas obtenidos en cualquier instrumento.

Programa analítico del curso:

- **FUNDAMENTOS**

Introducción. El espectrómetro de masa: Sistemas de introducción de muestras, fuente de ionización, analizador, óptica iónica, bombas de vacío y detectores. Tipos de iones. Tipos de fragmentaciones. Teoría del cuasi-equilibrio.

- **MÉTODOS DE IONIZACIÓN**

Métodos con volatilización previa: Ionización por electrones (EI), Ionización química (CI). Métodos de desorción. Fundamentos de la desorción de partículas cargadas. Desorción por Láser. Desorción por Láser asistida por matriz (MALDI). Métodos de ionización a presión atmosférica: Electrospray (ESI), Ionización Química a presión atmosférica (APCI), Fotoionización a presión atmosférica (APPI). Desorción por electrospray (DESI) y técnicas relacionadas. Análisis directo en tiempo real (DART).

- **ANALIZADORES**

Características de un analizador: Resolución, Sensibilidad, Precisión, Rango de masas. Descripciones y fundamentos teóricos de los analizadores: Cuadrupolo (Q), Trampas iónicas (QIT, LIT), Orbitrap, Resonancia iónica ciclotrónica con transformada de Fourier (FTICR), Sectores magnético-eléctrico (BE), 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, MSn. 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.

- **FRAGMENTACIONES**

Métodos de fragmentación. Disociaciones inducidas por colisión (CID) de baja y alta energía. Disociaciones inducidas por colisión dentro de la fuente de ionización. Disociación multifotónica infrarroja (IRMPD). Mecanismos de fragmentación según la energía del ion precursor. Disociación por captura/transferencia electrónica.

- **APLICACIONES**

Acoplamiento de la cromatografía gaseosa y líquida a la espectrometría de masa. Monitoreo selectivo de iones y reacciones. Supresión e incremento iónico. Movilidad iónica. Cuantificación por espectrometría de masa. Análisis elemental. Uso de abundancias isotópicas. Aplicaciones en Química Medicinal, Forense y en la Medicina Clínica. Aplicaciones a la determinación de contaminantes, impurezas, toxinas. Aplicaciones a la elucidación estructural de productos naturales. Aplicaciones en Metabolómica y Lipidómica. Aplicaciones al estudio del mecanismo de reacciones orgánicas. Imágenes por espectrometría de masa.

BIBLIOGRAFIA

- Mass Spectrometry. Principles and Applications. E. De Hoffmann, J. Charette, V. Stroobant. Wiley. 2007.
- Mass Spectrometry. J. H. Gross. Springer. 2017.
- Espectrometría de Masa. Conceptos básicos". Gerardo M. Caballero. Editorial UNQ., 2024.
- 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.
- Liquid Chromatography-Mass Spectrometry. B. Ardey. Wiley 2003.

- Mass Spectrometry of Inorganic, Coordination and Organometallic Compounds. W. Henderson, J. S. McIndoe. John Wiley & Sons Inc. 2005.
- Reactive Intermediates. MS Investigations in Solution. L. S. Santos. WILEY-VCH. 2010.
- Publicaciones de los últimos años en revistas científicas.

Actividades prácticas propuestas:

El curso consta de clases teóricas y clases prácticas de problemas en las que se aplican los conocimientos teóricos vistos. Los problemas abarcan desde la interpretación de los espectros de masa y masa-masa, los cromatogramas de GC-MS y HPLC-MS, hasta la resolución de casos concretos en la determinación de contaminantes, impurezas de fármacos, química clínica y forense entre otras áreas.

Se enseñará también a procesar espectros y cromatogramas con plataformas de uso libre.

Se plantea realizar también dos clases prácticas experimentales demostrativas en un instrumento QTOF, que incluirán el procesado de las corridas cromatográficas, espectros y elucidación estructural de los analitos.