

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
U.B.A.

- 1.- DEPARTAMENTO de QUIMICA ORGANICA
- 2.- CARRERA DE: POSTGRADO/DOCTORADO
- 3.- 1er. y 2do. CUATRIMESTRE Año : 2004
- 4.- N° DE CODIGO DE CARRERA : 51
- 5.- MATERIA: "TOPICOS EN ESPECTROMETRIA DE MASA"

N° DE CODIGO: 4034

- 6.- PUNTAJE PROPUESTO : 3 Puntos
- 7.- PLAN DE ESTUDIO Año : 1987
- 8.- CARACTER DE LA MATERIA : Perfeccionamiento o actualización
- 9.- DURACION : DOS SEMANAS
- 10.- HORAS DE CLASE SEMANALES :

Teórico-Prácticas: 20 Hs
Problemas: 10 Hs.

- 11.- CARGA HORARIA TOTAL : 60 hs.
- 12.- ASIGNATURAS CORRELATIVAS: ----
- 13.- FORMA DE EVALUACION : Seminario - Examen final
- 14.- PROGRAMA ANALITICO : Se adjunta
- 15.- BIBLIOGRAFIA : Se adjunta

TOPICOS EN ESPECTROMETRIA DE MASA Curso 2004

La espectrometría de masa como base de métodos analíticos para la detección de biomoléculas de bajo y alto peso molecular (< 300 kDa) y polímeros sintéticos

Materia de doctorado (3 puntos), perfeccionamiento o actualización
a dictarse en el
Primer (22/6-3/7) y Segundo (22/11-3/12) Cuatrimestre de 2004

Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales,
Universidad de Buenos Aires.

Antecedentes:

El curso analiza en profundidad las técnicas de espectrometría de masa útiles para el estudio de biomoléculas tanto de bajo peso molecular como de biomacromoléculas y polímeros sintéticos.

Entre ellas, las de mayor uso en la actualidad son las que utilizan como método de ionización (1) la desorción/ionización molecular asistida por láser ultravioleta (UV-MALDI) y (2) la nebulización bajo la acción de un campo eléctrico o ionización por electro-spray (ESI). Ambas proporcionan un método suave de ionización-volatilización que permite caracterizar masas molares y estructura de macromoléculas así como su distribución en mezclas de las mismas.

Programa:

Parte 1: Métodos de ionización

1-El análisis de iones gaseoso moleculares como herramienta analítica, espectrometría de masa (MS). Análisis de bio-macromoléculas por MS. Determinación de pesos moleculares y de estructura química. Fundamento de los métodos de ionización útiles basados en desorción (FD, FAB, SIMS, LD, MALDI, UV-MALDI) y en nebulización (ES, TESI, ESI), campo de aplicación de cada uno, ventajas y limitaciones. La problemática de preparación de las muestras para UV-MALDI-MS y ESI-MS.

2-UV-MALDI: Absorción de sólidos. Excitación con fuentes láser de 266 y 337 nm. Fenómeno de desorción / ionización. Análisis de los iones gaseosos generados. Espectrometría de masa por desorción láser (LD-MS). Uso de fotosensibilizadores (matrices) en la región UV para inducir desorción del aceptor (analito). Espectrometría de masa con desorción/ionización inducida por láser ultravioleta asistida por una matriz (fotosensibilizador) (UV-MALDI-MS). Propiedades de las matrices. Preparación de las muestras. Generación de ión molecular intacto e inducción de fragmentaciones.

3-ESI. Generación de iones moleculares policargados. Modelo de Dole (RMC) (Taylor; Coulomb; Raleigh). Desarrollos de Fenn. Determinación de la relación m/z. Influencia del medio en el proceso ESI (polaridad, pH, sales). Nano-ESI. Z-ESI.

4-Fundamento de los analizadores de iones gaseosos de uso actual (TOF, Q, IT, FTICR), campo de aplicación, ventajas y limitaciones .



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N°480.951/04

Buenos Aires, 29 NOV. 2004

VISTO

la nota de fecha 19 de abril de 2004 presentada por el Dr. Oscar Varela, Director del Departamento de Química Orgánica, mediante la cual eleva la Información y el Programa Analítico del Curso de Posgrado **"TOPICOS EN ESPECTROMETRIA DE MASA"**, que será dictado durante el **primer cuatrimestre de 2004** (desde 22/06/04 al 03/07/2004) y el **segundo cuatrimestre de 2004** (desde el 22/11/2004 al 03/12/2004), bajo la responsabilidad de la Dra. Rosa Erra Balsells,

CONSIDERANDO:

Lo actuado en la Comisión de Doctorado,
lo actuado por la Comisión de Investigación, Publicaciones y Postgrado,
lo actuado por este cuerpo en Sesión Ordinaria realizada en el día de la fecha,
en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo N° 113° del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE
CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
RESUELVE:

Artículo 1°: Autorizar el Dictado del Curso de Postgrado **"TOPICOS EN ESPECTROMETRIA DE MASA"**, de 60 hs. de duración.

Artículo 2°: Aprobar el Programa Analítico del Curso de Postgrado **"TOPICOS EN ESPECTROMETRIA DE MASA"**.

Artículo 3°: Aprobar un puntaje de tres (3) puntos para la carrera del Doctorado.

Artículo 4°: Aprobar un Arancel de 20 Módulos. Disponer que los montos recaudados serán utilizados conforme a lo dispuesto por Resolución CD N° 072/03.

Artículo 5°: Elévese a la Universidad de Buenos Aires, comuníquese al Director del Departamento de Química Orgánica, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Subsecretaría de Postgrado (con fotocopia del programa incluida).

Artículo 6°: Comuníquese a la Dirección de Alumnos, a la Dirección de Presupuesto y Contabilidad y a la Tesorería de la FCEyN (sin fotocopia del programa analítico).

Resolución CD N°

2245

Dra. ROSA ERRA BALSSELLS

Dr. PABLO MIGUEL JACOVETTI
ORDINARIO

5-La fragmentación como herramienta analítica en espectrometría de masa. Formas de evitarla y formas de inducirla. Accesorios o celdas CAD, CID, ECD, IRMPD, EI. Espectrometría de masa tandem (MSⁿ). Modo de operación PSD en el analizador de "tiempo de vuelo" (TOF). La fragmentación en procesos UV-MALDI y en ESI.

6-Equipamiento comercial actual por combinación de UV-MALDI y de ESI con diferentes analizadores de iones (i) solos (Q, TOF, IT, FTICR) o (ii) en tandem (QQQ, Q/TOF, Q/IT, IT/TOF, TOF/TOF, Q/FTICR). Criterio para seleccionar la combinación más ventajosa. Posibilidades y limitaciones.

7-Protocolos actuales de trabajo en proteómica y glicómica y otras "ómicas". Combinación de datos experimentales con banco de datos y programas de simulación ("a novo"). Protocolos de trabajo "bottom-up" y protocolos "top-down"

6-Conclusiones. UV-MALDI vs ESI en el campo de las macromoléculas, competencia o complementariedad?

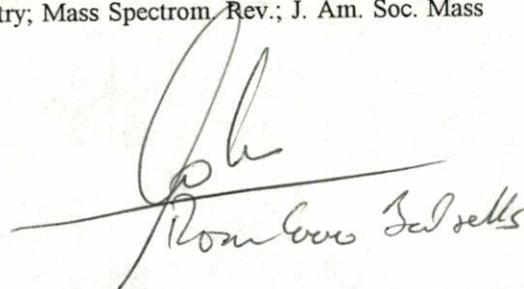
Parte 2: Aplicaciones

Determinación de pesos moleculares y de estructuras de bio-macromoléculas (proteínas, nucleótidos, nucleósidos, vitaminas, etc.) y macromoléculas en general. Análisis de modificaciones postraduccionales en proteínas. Análisis de complejos moleculares nativos. Folding y unfolding de proteínas. Análisis de la composición de biopolímeros (oligosacáridos, polisacáridos y compuestos glicoconjugados), determinación de la estructura, del peso molecular y de la relación cuantitativa de los oligómeros. Comparación de UV-MALDI-MS y ESI-MS con otras técnicas de uso en la analítica de macromoléculas (espectrometrías de masa: FD-MS, FAB-MS, SELDI (SALDI), DIOS y SIMS; técnicas cromatográficas: SEC; técnicas electroforéticas). Aplicaciones concretas en el campo de la biología molecular, en el campo de control de calidad de alimentos, de monitoreo en librerías combinatorias, en organométálicos y en polímeros sintéticos.

Bibliografía

- 1-G. Siuzdak, Mass Spectrometry for Biotechnology, Academic Press (1996).
- 2-What is Mass spectrometry?, Am. Soc. Mass Spectrom., (1998).
- 3-R.J. Cotter, Time-of-Flight Mass Spectrometry, ACS Symposium Books, 549, ACS (1994)
- 4-R.J. Cotter, Time-of-Flight Mass Spectrometry. Instrumentation and Applications in Biological Research, ACS Professional Reference Books, ACS (1997)
- 5-R. B. Cole (ed.), Electrospray Ionization Mass Spectrometry. J. Wiley & Sons, Inc. NY (1997).
- 6-B. S. Larsen and C. N. McEwen (eds.). Mass Spectrometry of Biological Materials. Marcel Dekker, Inc., NY (1998).
- 7- M. L. Gross (ed.). Mass Spectrometry in Biological Sciences: A Tutorial. NATO ASI Series, Series C, Vol. 353. Kluwer Acad. Pub., London (1990)
- 8-F. W. McLafferty and F. Turecek, Interpretation of Mass Spectra, University Science Books, Mill Valley, California (1993).
- 9-J. R. Chapman. Practical Organic Mass Spectrometry. Wiley, NY (1993).
- 10- E. W. Schlag (ed.). Time-of-Flight Mass Spectrometry and its Applications. Elsevier, NY (1994).
- 11- R. P. Newton and T. J. Walton, Applications of Modern Mass Spectrometry in Plant Science Research, Clarendon Press, Oxford, London (1996)
- 12 - D. C. Liebler, Introduction to Proteomics; Tools for the New Biology. Humana Press. Totowa, NJ (2002).
- 13- M. Mann and O. N. Jensen, Proteomic analysis of post-translational modifications (www.nature.com/naturebiotechnology) Vol 21 March 2003
- 14-J. Mass Spectrometry; Rapid Commun. Mass Spectrometry; Mass Spectrom. Rev.; J. Am. Soc. Mass Spectrom.,


Dr. GERARDO BURTON
DIRECTOR
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÁNICA


Román Luis Salas