

**Asignatura: Avances en Espectrometría de Masa de Macromoléculas****Nº de resolución:****Carácter:** materia de doctorado (optativa)**Duración:** 60 horas**Carga Horaria Semanal:** 10 semanas

6 horas semanales

teóricas: 4 horas

práctico: 2 horas

**Cantidad de ciclos de dictado anuales:** 1 cuatrimestre**Sistema de evaluación y promoción:** Seminario-examen final**Puntaje:** 3 puntos.**Correlatividades:** Materia de doctorado. No tiene correlatividades.**Responsables:** Dra Rosa Erra-Balsells**FUNDAMENTOS Y OBJETIVOS**

El curso analiza en profundidad las técnicas de espectrometría de masa útiles para el estudio de moléculas termolábles de alto peso molecular incluyendo 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 una matriz e inducida por un 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, OrbiTrap), campo de aplicación, ventajas y limitaciones .

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 (MS<sup>n</sup>). 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, OrbiTrap) 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 organometálicos 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).



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 500.957/12

Buenos Aires, 30 MAR 2015

VISTO

la nota presentada por la Dra. Rosa Erra Balsells, Directora del Departamento de Química Orgánica, mediante la cual eleva información del curso de posgrado **Avances en espectrometría de masa de macromoléculas** a dictarse durante el primer cuatrimestre de 2015 por la Dra. Rosa Erra Balsells

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado,

lo actuado por la Comisión de Posgrado,

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° 113º del Estatuto Universitario,

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

**Artículo 1º:** Autorizar el dictado del curso de posgrado **Avances en espectrometría de masa de macromoléculas** de 60 hs. de duración.

**Artículo 2º:** Aprobar el programa del curso de posgrado **Avances en espectrometría de masa de macromoléculas** obrante a fs 17 a 19 del expediente de la referencia.

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

**Artículo 4º:** Aprobar un arancel de 20 módulos. Disponer que lo recaudado en concepto de aranceles sea utilizado de acuerdo a la Resolución 072/2003.

**Artículo 5º:** Comuníquese a la Dirección de Movimiento de Fondos (Tesorería), a la Dirección de Presupuesto y Contabilidad y a la Dirección de Alumnos.

**Artículo 6º:** Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Orgánica, a la Biblioteca de la FCEN y a la Secretaría de Posgrado (con fotocopia del programa fs 17 a 19). Cumplido Archívese.

0466

Resolución CD N°  
SP /ga / 16/03/15

Dr. JOSÉ OLABE IPARRAGUIRRE  
SECRETARIO DE POSGRADO  
FCEN-UBA

Dr. JUAN CARLOS REBOVEDA  
DECANO