

**Asignatura: Avances en Espectrometría de Masa de Macromoléculas****N ro 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 termolábiles 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 ( $MS^n$ ). 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° 113° del Estatuto Universitario,

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

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

**Artículo 2°:** 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 3°:** Aprobar un puntaje máximo de tres (3) puntos para la Carrera del Doctorado.

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

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

**Artículo 6°:** 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.

Resolución CD N°  
SP / ga / 16/03/15

0466

Dr. JOSÉ OLABE IPARRAGUIRRE  
SECRETARIO DE POSGRADO  
FCEN-UBA

Dr. JUAN CARLOS REBOREDA  
DECANO