

## Espectrometría de Masa en Química Orgánica. Teoría y Aplicaciones.

### PROGRAMA

**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. Sistemas de matriz sólida y matriz líquida. Espectrometría de masa de iones secundarios. 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). Ionización atómica por plasma con acoplamiento inductivo (ICP)

**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), 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, MS<sub>n</sub>. Instrumentación: Triple cuadrupolo (QqQ): barridos de iones precursores, productos y pérdidas neutras, monitoreo selectivo de reacciones. Tándem en instrumentos de doble enfoque magnético - eléctrico. 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.

**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 y en la medicina clínica. Aplicaciones a la determinación de contaminantes, impurezas, toxinas. Aplicaciones a la elucidación estructural de productos naturales.

Aplicaciones en Metabolómica. Aplicaciones al estudio del mecanismo de reacciones orgánicas. Imágenes por espectrometría de masa.

#### Bibliografía.

- Mass Spectrometry. Principles and Applications. E. De Hoffmann, J. Charette, V. Stroobant. Wiley. 2007.
- Mass Spectrometry. J. H. Gross. Springer. 2004.
- 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.
- Liquid Chromatography-Mass Spectrometry. B. Ardey. Wiley 2003.