

Curso: Introducción a la Espectrometría de Masas de alta resolución utilizando electronebulización como fuente de iones.

Impartido por: Dr. Adolfo López Torres

Objetivo. Determinar formulas moleculares y/o identificar compuestos orgánicos mediante el análisis de espectros de masas ESI-HRMS.

Objetivos específicos.

Conocer:

- a) Conceptos básicos de espectrometría de masas.
- b) Configuración básica de un espectrómetro de masas.
- c) Fuentes de ionización con mayor número de aplicaciones en espectrometría de masas molecular moderna.
- d) Preparación de muestras para ESI-MS.
- e) Parámetros de operación de un ESI-Q-TOF (operación del equipo en tiempo real mediante acceso remoto).
- f) Método de introducción de muestras.
- g) Análisis de espectros de masas.

Temas y subtemas:

- a) Nomenclatura en espectrometría de masas
 - Ion
 - Ion molecular
 - Ion fragmento
 - Isótopo
 - Patrón isotópico
 - Aducto
 - Masa nominal
 - Masa exacta
 - Pérdidas neutras
 - Espectro continuo y centroide
 - Sensibilidad
 - Resolución
 - Error de masa
- b) Configuración básica de un espectrómetro de masas.
 - Sistema de introducción de muestras
 - Interfase y sistema de vacío
 - Fuentes de ionización
 - Celdas de colisiones y analizadores de masas
- c) Preparación de muestras para ESI
 - Aditivos adecuados

- Solventes adecuados

- d) Introducción de muestras
 - Directo
 - Cromatográfico
- e) Parámetros de operación de un ESI-Q-TOF
- f) Calibración y ajuste de masa exacta
- g) Análisis de espectros de masas ESI-HRMS
- h) Análisis de muestras de participantes en tiempo real mediante acceso remoto

Nota. En el curso se intentará analizar por acceso remoto en tiempo real, algunas muestras de los participantes. El análisis se puede suspender por condiciones inadecuadas como tormentas eléctricas, falta de acceso a internet o mantenimiento del espectrómetro de masas. Para el análisis de las muestras de los participantes, se dará preferencia al orden cronológico de inscripción al curso y se procurará beneficiar a diferentes instituciones (por ejemplo, 1 muestra por participante, 5 instituciones diferentes). Para seleccionar las muestras, los participantes deberán enviar antes del 30 de junio de 2022 (al correo de los organizadores c.c.p. altorres@unpa.edu.mx), la estructura que proponen o el tipo de compuestos o los grupos funcionales que esperan, con la intención de seleccionar diferentes tipos de muestras para aumentar la diversidad de los ejemplos. Las muestras seleccionadas deberán entregarse en la Universidad del Papaloapan campus Tuxtepec (vía paquetería) a más tardar el 10 de julio de 2022. Las muestras que se envíen deben contener al menos 5 mg del compuesto de interés, pueden ser de origen sintético o natural, y deberán estar previamente tratadas con algún método adecuado de separación y/o purificación. Las muestras que no estén en condiciones adecuadas, no serán analizadas. Se pueden enviar compuestos en estado sólido o líquido, y se deberá indicar el(los) disolvente(s) en que es soluble. Los participantes que sean beneficiados con el análisis de las muestras, en caso de que registren los resultados en sus tesis o los publiquen en una revista, se comprometen a agradecer a la Universidad del Papaloapan y al CONACYT por el financiamiento de los proyectos INFRA-2015-01-252013 e INFRA-2021-317105.