



Universidad Nacional de San Luis  
Rectorado

"2014 - Año de Homenaje al Almirante Guillermo Brown,  
en el Bicentenario del Combate Naval de Montevideo"

**ES COPIA**  
OSCAR GUILLERMO SEGURA  
Director de Despacho  
UNSL

SAN LUIS, 22 MAY 2014

**VISTO:**

El Expediente EXP-USL: 4574/2014 mediante el cual se solicita la protocolización del Curso de Posgrado: **ESPECTROMETRÍA DE MASAS**; y

**CONSIDERANDO:**

Que el mencionado Curso se dicta en el ámbito de la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia del 28 de julio al 1º de agosto de 2014 bajo la responsabilidad y coordinación del Dr. Carlos **ARDANAZ**, Colaborador: Dr. Diego **CIFUENTE**, Auxiliar: Farm. Francisco Miguel **CECATI** todos de la Universidad Nacional de San Luis, con un crédito horario de 40 horas presenciales.

Que el Comité Científico del Programa de Posgrado en Bioquímica y Ciencias Biológicas sugiere la aprobación del Curso propuesto.

Que el Consejo de Posgrado de la Universidad Nacional de San Luis en su reunión del 13 de mayo de 2014, luego de su análisis acordó aprobar la propuesta como Curso de Posgrado, según lo establecido en Ordenanza CS Nº 23/09.

Que corresponde su protocolización.

Por ello y en uso de sus atribuciones

**EL RECTOR DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN LUIS**

**RESUELVE:**

**ARTÍCULO 1º.-** Protocolizar el dictado del Curso de Posgrado: **ESPECTROMETRÍA DE MASAS**, en el ámbito de la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia del 28 de julio al 1º de agosto de 2014 bajo la responsabilidad y coordinación del Dr. Carlos **ARDANAZ** (DNI Nº 11.310.368), Colaborador: Dr. Diego **CIFUENTE** (DNI Nº 22.043.229), Auxiliar: Farm. Francisco Miguel **CECATI** (DNI Nº 31.050.396) todos de la Universidad Nacional de San Luis, con un crédito horario de 40 horas presenciales.

Ing. Jorge Raúl Oguna  
Vicerrector - UNSL  
a/c Rectorado RR Nº 576/14

Dra. Alicia Marcela Pirilista  
Secretaría de Posgrado  
U.N.S.L.

Cpde RESOLUCIÓN R Nº **577**



Universidad Nacional de San Luis  
Rectorado

"2014 - Año de Homenaje al Almirante Guillermo Brown,  
en el Bicentenario del Combate Naval de Montevideo"

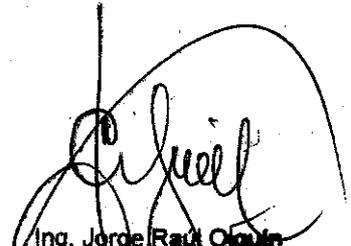
**ES COPIA**  
OSCAR GUILLERMO SEGURA  
Director de Despacho  
UNSL

**ARTÍCULO 2°.-** Aprobar el programa del Curso de referencia, de acuerdo al **ANEXO** de la presente disposición.-

**ARTÍCULO 3°.-** Comuníquese, insértese en el Libro de Resoluciones y archívese.-

**RESOLUCIÓN R N° 577**  
mav

  
Dra. Alicia Marcela Printista  
Secretaría de Posgrado  
U.N.S.L.

  
Ing. Jorge Raúl Olguin  
Vice rector - UNSL  
a/c Rectorado RR N° 576/4



Universidad Nacional de San Luis  
Rectorado

"2014 - Año de Homenaje al Almirante Guillermo Brown,  
en el Bicentenario del Combate Naval de Montevideo"

**ES COPIA**  
OSCAR GUILLERMO SEGURA  
Director de Despacho  
UNSL

## ANEXO

**DENOMINACIÓN DEL CURSO: ESPECTROMETRÍA DE MASAS**

**UNIDAD ACADÉMICA RESPONSABLE:** Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia

**CATEGORIZACIÓN:** Capacitación

**RESPONSABLE:** Dr. Carlos ARDANAZ

**COLABORADOR:** Dr. Diego CIFUENTE

**AUXILIAR:** Farm. Francisco Miguel CECATI

**COORDINADOR:** Dr. Carlos ARDANAZ

**CRÉDITO HORARIO:** 40 horas

**MODALIDAD DE DICTADO:** Presencial

**FECHA DE DICTADO DEL CURSO:** 28 de julio al 1° de agosto de 2014

**FECHA PREVISTA PARA ELEVAR LA NÓMINA DE ALUMNOS**

**APROBADOS:** 29 de agosto de 2014

**DESTINATARIOS:** Egresados con título de grado universitario en Lic. en Química, en Bioquímica, Farmacia, Ingeniería en Alimentos, Lic. en Ciencias Biológicas y profesionales de Ciencias afines a la Química de Compuestos Orgánicos, Detección e Identificación.

**LUGAR DE DICTADO:** Laboratorio de Química Orgánica. 2do Piso Edificio "El Barco".

**CUPO:** 12 personas.

**FUNDAMENTACIÓN:** Se ha impuesto ampliamente la técnica de espectrometría de masas en el control de calidad de productos de consumo toda índole, en particular en alimentos y materias primas, en la detección de productos peligrosos para la salud pública así como en la seguridad pública, privada y de la sociedad toda, haciendo que sea una de las herramientas mas versátiles y sensibles en su aplicación, haciendo necesario que sean conocidos sus principios y aplicación en diversas ramas de las profesiones vinculadas a la vida en sociedad.

### OBJETIVOS:

**Objetivo General:** Lograr un adecuado nivel de conocimientos en los principios de la técnica, alcances y limitaciones instrumentales.

**Objetivo Particular:** Alcanzar un correcto manejo de las notaciones y representación de los fenómenos que se producen en el instrumento, reglas, modos operativos, esquemas de interpretación de espectros, modos alternativos de indagar en la determinación estructural, y finalmente la utilidad y aplicación de la misma en controles de alimentos, medicamentos, peritajes, pesticidas, productos industriales y o naturales, etc.

Cpde RESOLUCIÓN R N° 577

Ing. Jorge Raúl Olgún  
Vicerrector UNSL  
c/c Rectorado RR N° 577/H

Dra. Alicia Marmola Pithilista  
Secretaría de Posgrado  
U.N.S.L.



Universidad Nacional de San Luis  
Rectorado

"2014 - Año de Homenaje al Almirante Guillermo Brown,  
en el Bicentenario del Combate Naval de Montevideo"

**ES COPIA**  
OSCAR GUILLERMO SEGURA  
Director de Despacho  
UNSL

### CONTENIDOS MÍNIMOS:

1- Fundamentos, Técnica, 2- Notaciones, representación, 3- Reacciones de descomposición Inducidas por impacto electrónico, Reglas de Fragmentación., 4- Interpretación, 5- Espectrometría de masas de diversos compuestos orgánicos, 6- Aplicaciones al medio ambiente, alcances y futuro de esta técnica, 7- Manejo y aplicación de software AMDIS y Mass Frontier.

### PROGRAMA:

1- Fundamentos, Técnica:

1-1-Instrumentos, tipos ; 1-1-2-Introducción de muestras, cromatógrafo de gases acoplado, columnas capilares; 1-2-Ionización; 1-2-1-Ionización Química; 1-3-Separación de masas, poder resolutivo; 1-4-Registro; 1-5-Espectrometría de masas de baja y alta resolución; 1-6-Contribuciones Isotópicas.

2- Notaciones, representación:

2-1-Ionización por IE, representación; 2-2-Homólisis, heterólisis, hemi-heterólisis; 2-3-El Ión Molecular  $[M]^+$ ; 2-4- Propiedades del ión molecular; 2-5-Estudios Genéticos, Transiciones Metaestables; 2-6-Disociación Inducida por Colisión, Estudios MS/MS; 2-7-Aplicaciones.

3- Reacciones de Descomposición Inducidas por impacto electrónico:

3-1- Fragmentación simple; 3-2- Reglas de descomposición, influencia de heteroátomos en la fragmentación; 3-3- Transposiciones.

4- Interpretación.

4-1- Información general; 4-2- Esquema de Interpretación ; 4-3- Manejo y aplicación de sistemas de identificación y deconvolución automática de espectros de masa.

5- Espectrometría de masas de diversos compuestos orgánicos.

6- Espectrometría de masas. Otros métodos de Ionización blandos:

Técnicas de Ionización en fase Gaseosa (Ionización química CI). Técnicas de Ionización en fase líquida a baja presión (Bombardeo con átomos rápidos FAB; Desorción por laser asistida por matriz, MALDI). Técnicas de Ionización en fase líquida a alta presión (Electronebulización, ESI). Fundamentos. Aplicaciones a macromoléculas. Resolución de Problemas.

7- Aplicaciones al medio ambiente, alcances y futuro de esta técnica.

**SISTEMA DE EVALUACIÓN:** continua con evaluación final escrita.

### BIBLIOGRAFÍA:

- Allison J., Stepnowski R.M.; Anal.Chem. 59, 1072A (1987).
- Central Institute of Nutrition and Food Research, Mass Spectra of Volatiles in Food, SpecData, 2nd Edition, (2003).
- Cooks R.G.; Mc Luckey y Kaiser R.E.; Chem. Eng.News, 3 (1991).

Cpde RESOLUCIÓN R N° 577

Ing. Jorge Raúl Oguín  
Vice Rector - UNSL  
a/c Rectorado RR N° 57/14

Dra. Alicia Marchesi Pringles  
Secretaria de Posgrado  
U.N.S.L.



Universidad Nacional de San Luis  
Rectorado

**ES COPIA**  
OSCAR GUILLERMO SEGURA  
Director de Despacho

- Budzikiewicz-Djerassi-Williams; "Interpretation of Mass Spectra of Organic Compounds". Ed. Holden Day (1964)
- \* Budzikiewicz-Djerassi-Williams; "Structure Elucidation of Natural Products by Mass Spectrometry", Vol I, II. Ed. Holden Day(1966).
- COOKS, BEYNON, CAPRIOLI, LESTER; Metastable Ions; Elsevier, 1973.
- Frantisek Turecek and Fred W. McLafferty; Interpretation of Mass Spectra (May 1993)
- Geneva Bioinformatics, SmileMS – Small Molecule Identification Software for Tandem Mass Spectrometry (2011).
- GOTTLIEB; Introducción a la Espectrometría de Masas de Substancias Orgánicas; OEA, (1983-1994).
- HAMMING-FOSTER; Interpretation of Mass Spectra of Organic Compounds; Acad. Press, (1972).
- JOHNSTONE R.A.W.; Mass Spectrometry; V.3; The Chemical Soc., Burlington House, (1975).
- Kühnle, Rolf; Mass Spectra of Pesticides (2009 ).
- Maurer Hans H., Karl Pflieger, Armin A.; Weber Mass Spectral Library of Drugs, Poisons, Pesticides, Pollutants and Their Metabolites (2011), CDROM/Print .
- Maurer Hans H., Dirk K. Wissenbach, Armin A. Weber; LC-MSn Library of Drugs, Poisons, and Their Metabolites 2014, CDROM.
- Mc FADDEN; Techniques of Combined Gas Chromatography / Mass Spectrometry, W. Interscience, (1973).
- McLafferty, F.W.; "Interpretation of Mass Spectra", (1973).
- McLafferty, F.W.; Mass Spectral data collection. (1977).
- Mondello, Luigi; Mass Spectra of Flavors and Fragrances of Natural and Synthetic Compounds, 2nd Edition, (2011).
- Mondello, Luigi; Mass Spectra of Pesticides with Retention Indices 2011.
- Nist, NIH, EPA; Mass Spectral data collection. (2008)
- Herbert Oberacher; Wiley Registry of Tandem Mass Spectral Data: MS for ID (2012).
- Pasto J., Johnson C. R.;"Determinación de Estructuras Orgánicas". Ed. Reverté.
- Q.N. Porter; "Mass Spectrometry of Heterocyclic Compounds". Ed. Wiley-Interscience. 4° Edi. 1999.
- Porter and Baldas; "Mass Spectrometry of Heterocyclic Compounds". Ed. Wiley-Interscience. Ediciones 1971 y 1985.
- REED; Aplications' of the Mass Spectroscopy to Organic Chemistry; Acad. Press, 1966.
- Rösner Peter, Mass Spectra of Designer Drugs (2014).
- Scheinmann F.,"An Introduction to Spectroscopic Methods for the Identification of Organic Compounds". Vol. II. Ed. Pergamon Press.
- Seibl J.; "Espectrometría de Masas". Ed. Alhambra.
- Seibl J.; "Tablas para la Elucidación Espectroscópica de Compuestos Orgánicos". Editorial Alhambra.
- Silverstein, "Identificación de Compuestos Orgánicos". 4ta. Ed., J. Wiley, (1994).
- Todd J.F.T., et all; Int.J.Mass Spectrom.Ion Proc., 60, 85 (1983).

Ing. Jorge Raúl Olguín  
Vice Rector - UNSL  
a/c Rectorado RR N° 52/14

Dra. Alicia Marnela Primitivo  
Secretaria de Posgrado  
U.N.S.L.



Universidad Nacional de San Luis  
Rectorado

"2014 - Año de Homenaje al Almirante Guillermo Brown,  
en el Bicentenario del Combate Naval de Montevideo"

**ES COPIA**

OSCAR GUILLERMO SEGURA  
Director de Despacho

- Understanding Mass Spectra: A Basic Approach by R. Martin Smith (Sep 27, 2004)
- Wiley Registry of Mass Spectral Data, (Fred W. McLafferty), 10th Edition, (2013).
- WEST, A.R.; Advances in Mass Spectrometry, V.6; Applied Science, (1974).
- Willams y Fleming; "Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica". Ed. URMO S.A.
- Yarkov, Alexander, Mass Spectra of Organic Compounds, SpecData, (2004).
- Wiley, Mass Spectral Library, Registry 10th Edition / NIST 2011

**ARANCEL:**

- Alumnos de UNSL: \$200 (pesos doscientos).
- Alumnos Externos: \$300 (pesos trescientos).

**COSTOS Y FUENTE DE FINANCIAMIENTO:** Aranceles y Recursos de Área de Química Orgánica.

Cpde RESOLUCIÓN R N° 577  
may

Dra. Alicia Marcela Printista  
Secretaría de Posgrado  
U.N.S.L.

Ing. Jorge Raúl Olgún  
Vicerector - UNSL  
a/c Rectorado RR N° 576/14