



RECTORADO

SAN LUIS, 8 de septiembre de 2023.-

VISTO:

El EXPE: 4723/2023, mediante el cual se solicita la protocolización del Curso de Posgrado: “ESTRATEGIAS DE ANÁLISIS MEDIANTE ESPECTROMETRÍA DE MASA”; y

CONSIDERANDO:

Que el Curso de Posgrado se propone dictar en el ámbito de la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia del 26 de octubre al 17 de noviembre de 2023 con un crédito horario de CUARENTA (40) horas presenciales y bajo la coordinación de la Dra. María Evangelina GUIÑEZ.

Que la Comisión Asesora de Posgrado de la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia recomienda aprobar el curso de referencia.

Que el Consejo de Posgrado de la Universidad Nacional de San Luis en su reunión del 22 de agosto de 2023, analizó la propuesta y observa que el programa del curso, bibliografía, metodología de evaluación y docentes a cargo, constituyen una propuesta de formación de posgrado de calidad en su campo específico de estudio.

Que, por lo expuesto, el Consejo de Posgrado aprueba la propuesta como Curso de Posgrado, según lo establecido en Ordenanza CS N° 35/2016.

Que corresponde su protocolización.

Por ello, y en uso de sus atribuciones:

EL RECTOR DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN LUIS



RECTORADO

RESUELVE:

ARTÍCULO 1º.- Protocolizar el dictado del Curso de Posgrado: “ESTRATEGIAS DE ANÁLISIS MEDIANTE ESPECTROMETRÍA DE MASA”, en el ámbito de la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia del 26 de octubre al 17 de noviembre de 2023 con un crédito horario de CUARENTA (40) horas presenciales.

ARTÍCULO 2º.- Protocolizar como equipo docente del curso: Responsable: Dra. Soledad CERUTTI, DU N° 25700306; Colaboradora: Dra. María Evangelina GUIÑEZ, DU N° 29539065 y Auxiliar: Dr. Leonardo MARIÑO REPIZO, DU N° 19079921; todos de la Universidad Nacional de San Luis.

ARTÍCULO 3º.- Aprobar el programa del Curso de referencia, de acuerdo al ANEXO de la presente disposición.

ARTÍCULO 4º.- Comuníquese, Publíquese en el Digesto Administrativo de la Universidad Nacional de San Luis, insértese en el Libro de Resoluciones, y archívese.-

NGV

Documento firmado digitalmente según Ordenanza Rectoral N° 15/2021 por: Rector MORIÑIGO, Víctor Aníbal – Secretaria de Posgrado REYES, Nora Susana.

RECTORADO

ANEXO

IDENTIFICACIÓN DEL CURSO:

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

DENOMINACIÓN DEL CURSO: “ESTRATEGIAS DE ANÁLISIS MEDIANTE ESPECTROMETRÍA DE MASA”.

CATEGORIZACIÓN: Perfeccionamiento.

FECHA DE DICTADO DEL CURSO: 26 de octubre al 17 de noviembre de 2023.

MODALIDAD DE DICTADO: Presencial.

CRÉDITO HORARIO TOTAL: 40 horas (25 hs. teóricas, 15 hs. de prácticas de laboratorio).

COORDINADORA: Dra. María Evangelina GUIÑEZ, DU N° 29539065.

EQUIPO DOCENTE:

RESPONSABLE: Dra. Soledad CERUTTI.

COLABORADORA: Dra. María Evangelina GUIÑEZ.

AUXILIAR: Dr. Leonardo MARIÑO REPIZO.

PROGRAMA ANALÍTICO:

FUNDAMENTACIÓN

En particular, el curso explora los distintos aspectos de la técnica a través de una cobertura cronológica de su estado del arte en los contenidos que la conforman, para

RECTORADO

demostrar finalmente sus aplicaciones modernas en diversos ámbitos científicos y de la vida diaria.

OBJETIVOS:

Este curso permitirá al estudiante de posgrado familiarizarse con aspectos fundamentales básicos y profundizar su conocimiento sobre la espectrometría de masa, tanto para quienes la apliquen en sus trabajos de tesis, como para aquellos que requieran conocer los alcances y aplicaciones de esta estrategia integral de análisis.

CONTENIDOS MÍNIMOS:

Este curso introducirá los conceptos básicos fundamentales y la terminología empleada en el marco del estudio y la aplicación de la espectrometría de masa, distintos enfoques instrumentales, analizadores de masa más comunes, sus modos de operación, su relación a los conceptos de masas exactas, masas nominales, resolución de masas, como así también los detectores empleados. Se explicarán las estrategias más importantes para la ionización de los compuestos de distinta naturaleza química, interpretación de datos y consideraciones para la espectrometría de masa de moléculas pequeñas y grandes; entre otros. Asimismo, se abordarán las estrategias más conocidas de introducción de muestra, su preparación para las distintas configuraciones instrumentales y tendencias de miniaturización, efectos de matriz, como así también aspectos de optimización, validación, empleos de métricas verdes y aplicaciones para el análisis cualitativo y cuantitativo. Se demostrará la extensa aplicabilidad de la espectrometría de masa a través de ejemplos en distintas ramas de la ciencia y de la vida diaria.

El curso está diseñado para brindar a los estudiantes una visión amplia de la espectrometría de masa, resaltando ventajas y considerando limitaciones con el objeto de favorecer la formación de un criterio que permita seleccionar la instrumentación más apropiada para un desafío analítico particular.

PROGRAMA DETALLADO:

Tema 1

RECTORADO

La Espectrometría de Masa Antecedentes. Definiciones y fundamentos teóricos. Terminología. Diseño instrumental: analizadores, modos de operación, conceptos fundamentales. Alcances y Limitaciones.

Tema 2

El Proceso de Ionización: Fundamentos. Estrategias universalmente empleadas, selección. Estado del arte en técnicas diversas de ionización a presión atmosférica. Detección. El espectro de masa, interpretación de la información para pequeñas y grandes moléculas. Biblioteca de espectros de Masas.

Tema 3

Introducción de la Muestra: Estrategias directas y separativas (infusión directa, inyección directa, cromatografía líquida, cromatografía gaseosa, electroforesis capilar, headspace, otras variantes miniaturizadas).

Tema 4

Tratamiento de Muestra y Análisis: Tipo de muestra (estado, naturaleza). Adaptaciones. Concepciones de screening y de enfoque amplio para el análisis de compuestos. Efecto de Matriz. Calibración. Metodologías de extracción y limpieza, consideraciones. Optimización y validación de la metodología. Métricas verdes. Análisis cualitativo. Análisis cuantitativo.

Tema 5

Aplicaciones: Ejemplos orientados a las Ciencias ómicas (proteómica, metabolómica), Análisis forense, Química ambiental, Control de calidad de principios farmacéuticos, Inocuidad alimentaria; entre otros.

Actividad Experimental:

RECTORADO

TP1: Práctico demostrativo: familiarización con el espectrómetro de masa, sus partes, fuentes de ionización, introducción de muestra con especial énfasis en el acoplamiento cromatografía líquida-espectrometría de masa, curvas de calibrado, señal analítica.

TP2: Determinación de contaminantes emergentes por UHPLC-MS/MS. Consideraciones de tratamiento de muestra. Análisis de datos. Informe

SISTEMA DE EVALUACIÓN:

La evaluación será individual y consistirá en la resolución de preguntas relacionada a los contenidos impartidos en el curso.

BIBLIOGRAFÍA:

- [1] J. McCullagh, N. Oldham, Mass Spectrometry: Oxford University Press (2019).
- [2] D. Elpa, G. Prabhu, S. Wu, K. Tay, P. Urban, Automation of mass spectrometric detection of analytes and related workflows: A review. *Talanta*, 208 (2020) 120304.
- [3] M. Ridgeway, M. Lubeck, J. Jordens, M. Mann, M. Park, Trapped ion mobility spectrometry: A short review. *International Journal of Mass Spectrometry*, 425 (2018) 22-35.
- [4] M.V. Orna, G. Eggleston, A.F. Bopp, Chemistry's Role in Food Production and Sustainability: Past and Present, ACS Publications (2019).
- [5] K.Hayakawa, Chemistry of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), Nitropolycyclic aromatic hydrocarbons (NPAHs) and other oxidative derivatives of PAHs. In *Polycyclic Aromatic Hydrocarbons* Springer, Singapore (2018) 3-10.
- [6] MDV. Ponce, M. Cina, M., C. López, S. Cerutti. Polyurethane Foam as a Novel Material for Ochratoxin A Removal in Tea and Herbal Infusions—A Quantitative Approach. *Foods*,12(9) (2023), 1828.

RECTORADO

- [7] M. Guíñez, L.D. Martínez, L. Fernández, S. Cerutti, Dispersive liquid–liquid microextraction based on solidification of floating organic drop and fluorescence detection for the determination of nitrated polycyclic aromatic hydrocarbons in aqueous samples, *Microchemical Journal* 131 (2017) 1-8.
- [8] L. Mariño-Repizo, H. Goicoechea, J. Raba, S. Cerutti, A simple, rapid and novel method based on salting-out assisted liquid–liquid extraction for ochratoxin A determination in beer samples prior to ultra-high-performance liquid chromatography coupled to tandem mass spectrometry, *Food Additives & Contaminants: Part A*, 35(8) (2018), 1622-1632.
- [9] M. Guíñez, C. Bazan, L.D. Martínez, S. Cerutti, Determination of nitrated and oxygenated polycyclic aromatic hydrocarbons in water samples by a liquid–liquid phase microextraction procedure based on the solidification of a floating organic drop followed by solvent assisted back-extraction and liquid chromatography–tandem mass spectrometry, *Microchemical Journal* 139 (2018) 164-173.
- [10] M. Guíñez, R. Canales, L.D. Martínez, S. Cerutti, Solvent-based de-emulsification dispersive liquid–liquid microextraction coupled with UPLC-MS/MS for the fast determination of ultratrace levels of nitrated and oxygenated polycyclic aromatic hydrocarbons in environmental samples, *Analytical Methods* 10(8) (2018) 910-919.
- [11] F. Fujiwara, M. Guíñez, S. Cerutti, P. Smichowski, UHPLC-(+)APCI-MS/MS determination of oxygenated and nitrated polycyclic aromatic hydrocarbons in airborne particulate matter and tree barks collected in Buenos Aires city, *Microchemical Journal* 116 (2014) 118-124.
- [12] Guíñez, M., Escudero, L., Mandelli, A., Martínez, L. D., & Cerutti, S. Volcanic ashes as a source for nitrated and oxygenated polycyclic aromatic hydrocarbon pollution. *Environmental Science and Pollution Research*, 27(14) (2020) 16972-16982.
- [13] CM. Teglia, M. Guíñez, S. Cerutti, F. Gutierrez, HC. Goicoechea. A novel and sustainable pipette-tip solid-phase microextraction testing of six carbon-based nanomaterials as proof of concept for the determination of sixteen emerging pollutants from active veterinary principles. *Green Analytical Chemistry* 5 (2023) 100060.

RECTORADO

- [14] M. Guiñez, R. Canales, C. Talio, D. Gómez, P. Smichowski, Determination of heterocyclic aromatic amines in ashes from biomass burning by UHPLC-MS/MS after ultrasound-assisted dispersive solid-liquid microextraction, *Talanta* 206 (2020) 120182.
- [15] C.M. Teglia, M. Guiñez, H.C. Goicoechea, M.J. Culzoni, S. Cerutti, Enhancement of multianalyte mass spectrometry detection through response surface optimization by least squares and artificial neural network modelling, *Journal of Chromatography A* (2019) 460613.
- [16] H. Martínez-Pérez-Cejuela, M. Guiñez, E. Simó-Alfonso, P. Amorós, E. Haskouri, J.M. Herrero-Martínez, In situ growth of metal-organic framework HKUST-1 in an organic polymer as sorbent for nitrated and oxygenated polycyclic aromatic hydrocarbon in environmental water samples prior to quantitation by HPLC-UV. *Microchimica Acta*, 187(5) (2020) 1-9.
- [17] C. M. Teglia, M. Guiñez, M. Culzoni, S. Cerutti, Determination of residual enrofloxacin in eggs due to long term administration to laying hens. Analysis of the consumer exposure assessment to egg derivatives. *Food Chemistry*, (2021)129279.
- [18] A. Bochetto, N. Merino, M. Kaplan, M. Guiñez, S. Cerutti, Design of a combined microextraction and back-extraction technique for the analysis of mycotoxins in amaranth seeds. *Journal of Food Composition and Analysis*, 98, (2021) 103818.
- [19] R. Canales, M. Guiñez, C. Talio, M. Reta, S. Cerutti, Development of a green and efficient methodology for the heterocyclic aromatic amine determination in biomass samples generated from cigarette combustion and tobacco. *Environmental Science and Pollution Research*, 28(5) (2021) 5205-5217.
- [20] MDV. Ponce, M. Cina, M., C. López, S. Cerutti Synthesis and evaluation of a ZnAl layered double hydroxide for the removal of ochratoxin A. *Analytical Methods* 14(29) (2022) 2841–2848.
- [21] B.B. Hansen, S. Spittle, B. Chen, D. Poe, Y. Zhang, J.M. Klein et al., Deep Eutectic Solvents: A Review of Fundamentals and Applications. *Chemical Reviews* (2020).

RECTORADO

- [22] L. Joseph, B. M. Jun, M. Jang, C.M. Park, J.C. Muñoz-Senmache, A.J. HernándezMaldonado, A. Heyden, M. Yu, Y. Yoon, Removal of contaminants of emerging concern by metal-organic framework nanoadsorbents: A review, *Chemical Engineering Journal* (2019).
- [23] B.A. de Marco, B.S. Rechelo, E.G. Tótolí, A.C. Kogawa, H.R.N. Salgado, Evolution of green chemistry and its multidimensional impacts: A review, *Saudi Pharmaceutical Journal* 27(1) (2019) 1-8.
- [24] J. Płotka-Wasyłka, A new tool for the evaluation of the analytical procedure: Green Analytical Procedure Index, *Talanta* 181 (2018) 204-209.
- [25] F. Pena-Pereira, W. Wojnowski, M. Tobiszewski, AGREE—Analytical GREENess Metric Approach and Software. *Analytical chemistry*, 92(14) (2020) 10076- 10082.
- [26] L. Ming-Jie et al., Progress of extraction solvent dispersion strategies for dispersive liquid-liquid microextraction. *Chinese Journal of Analytical Chemistry* 43 (8) (2015) 1231-1240.
- [27] R. López-Ruiz, R. Romero-González, A. G. Frenich, Ultrahigh-pressure liquid chromatography-mass spectrometry: an overview of the last decade. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 118 (2019) 170-181.
- [28] B. K. Matuszewski, M. L. Constanzer, C.M. Chavez-Eng, Strategies for the assessment of matrix effect in quantitative bioanalytical methods based on HPLC–MS/MS. *Analytical chemistry* 75 (13) (2003) 3019-3030.
- [29] J. F. Bienvenu, G. Provencher, P. Bélanger, R. Bérubé, P. Dumas, S. Gagné et al., Standardized procedure for the simultaneous determination of the matrix effect, recovery, process efficiency, and internal standard association. *Analytical chemistry*, 89(14) (2017) 7560-7568.
- [30] B. Gilbert-López et al., Cap. 10: Foodomics: LC and LC-MS-based omics strategies in food science and nutrition, En *Liquid Chromatography* (2017). <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-805392-8.00010-4>.

RECTORADO

[31] J.M. Cevallos-Cevallos Cap.1: Metabolomics in Food Science, En Advances in Food and Nutrition Research, Vol. 67, ISSN 1043-4526 (2012). <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-394598-3.00001-0>.

[32] A. Steinborn et al. (2008) Complex residue definition in Regulation (EC) No. 396/2005 –What is possible to analyze?; Annex to the poster PA 130 presented at the EPRW (2008), Berlín, Germany.

[33] EFSA PPR Panel (EFSA Panel on Plant Protection Products and their Residues) (2016) Guidance on the establishment of the residue definition for dietary risk assessment. EFSA Journal 14(12)4549 (2016) 129. doi:10.2903/j.efsa.2016.4549.

CARACTERÍSTICAS DEL CURSO:

DESTINATARIOS Y REQUISITOS DE INSCRIPCIÓN: Egresados de carreras universitarias o carreras con 4 años de duración como mínimo. Licenciatura en Química, Ingeniería Química, Ingeniería en Alimentos, Bioquímica, Licenciados en Ciencia y Tecnología de los Alimentos y profesionales afines.

CUPO: Máximo 25 estudiantes.

PROCESO DE ADMISIÓN: El proceso de admisión consistirá en la evaluación del título de grado del aspirante y el interés particular del postulante en la realización del curso.

CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES:

FECHA	TIPO DE ACTIVIDAD/TEMAS A DESARROLLAR	DOCENTE/S RESPONSABLE/S
11/08/2023	Tema 1-Tema 2	Dra. Soledad CERUTTI
12/08/2023	Tema 3 - TP1	Dra. Soledad CERUTTI Dra. María GUIÑEZ

RECTORADO

		Dr. Leonardo MARIÑO REPIZO
22/09/2023	Tema 4 -Tema 5	Dra. Soledad CERUTTI Dra. María GUIÑEZ Dr. Leonardo MARIÑO REPIZO
23/9/2023	TP 2	Dra. Soledad CERUTTI Dra. María GUIÑEZ

LUGAR DE DICTADO: Locaciones de la Facultad de Química Bioquímica y Farmacia - Universidad Nacional de San Luis. Av. Ejército de los Andes 950. CP 5700, San Luis.

FECHA PREVISTA PARA ELEVAR LA NÓMINA DE ESTUDIANTES APROBADOS: Octubre 2023.

FINANCIAMIENTO DEL CURSO:

COSTOS: Insumos y materiales.

FUENTES DE FINANCIAMIENTO: El curso se autofinancia mediante aranceles.

ARANCEL GENERAL: PESOS DIEZ MIL (\$10000).

BECA AL DOCENTE DE LA UNSL: Se otorgará una beca del 50% por lo que el arancel final será de PESOS CINCO MIL (\$5000) en este caso.

BECA AL ESTUDIANTE DE LA UNSL: Se otorgará una beca del 50% por lo que el arancel final será de PESOS CINCO MIL (\$5000) en este caso.

Hoja de firmas