



**UNIVERSIDAD DE BURGOS**

**VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN**

**PARQUE CIENTÍFICO TECNOLÓGICO**

# LC/MS

## (Liquid Chromatography-Mass Spectrometry)

### DESCRIPCIÓN DE LOS EQUIPOS Y ACCESORIOS

Se propone adquirir un equipo de espectrometría de masas en tándem, acoplado a un sistema de cromatografía líquida, que proporcione altas capacidades de separación, identificación y cuantificación de sustancias en mezclas complejas.

Hay varias posibilidades de equipos que cumplen con estas características.

En relación a la cromatografía líquida, se solicita un sistema HPLC (high-performance liquid chromatography) o UHPLC (ultra-high performance liquid chromatography), siendo esta última la que permite mejores separaciones y más rápidas. La Universidad de Burgos dispone de varios sistemas HPLC pero no existen sistemas UHPLC.

En relación a la tecnología de espectrometría de masas en tándem, se propone un sistema analizador de masas tipo QTOF (Quadrupole Time-Of-Flight), Cuadrapolo-Orbitrap. Ambas tecnologías permiten alcanzar excelentes niveles de exactitud de masa, rango dinámico y sensibilidad que permiten la identificación y cuantificación de compuestos desconocidos con gran precisión.

Algunas casas comerciales ofrecen la tecnología de espectrometría de masas en tándem conjugada con movilidad iónica, IMS (Ion Mobility Spectrometry) que confiere una dimensión adicional de separación al sistema LC/MS para muestras complejas que requieran de un alto poder de resolución. En el campo de la síntesis orgánica, en la que trabajan algunos de nuestros grupos de investigación, la tecnología IMS-QTOF constituye una herramienta de enorme potencial al ser capaz de poder discernir entre diferentes tipos de isómeros.



# UNIVERSIDAD DE BURGOS

## VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN

### PARQUE CIENTÍFICO TECNOLÓGICO

#### OBJETIVOS CIENTÍFICOS

Se requiere de un equipo LC/MS actualizado, incorporando las capacidades de separación, identificación y cuantificación que ofrecen los nuevos equipos que incorporan UHPLC o tecnologías tipo QTOF o Q-Orbitrap.

Este equipo se situará en el Parque Científico Tecnológico (PCT) de la UBU con el fin de que pueda ser utilizado por todos los grupos de investigación de la UBU que lo soliciten, las empresas del entorno e incluso, si se posibilita la adquisición de las últimas tecnologías en LC/MS, por investigadores de otras Universidades o Centros de Investigación de Castilla y León donde no se disponga de dichas tecnologías.

#### Aplicaciones:

- Identificación de lípidos en aceites de pescado y en productos de reacciones enzimáticas dirigidas a la obtención de acilglicéridos enriquecidos en omega-3.
- Caracterización de extractos naturales obtenidos usando de tecnologías de fluidos supercríticos. E.g : compuestos fenólicos, alquilresorcinoles, antioxidantes en general, etc.
- Cuantificación de contaminantes orgánicos persistentes (COPs) en aceites y harinas de pescado.
- Detección, identificación y cuantificación de los componentes que provocan el ensuciamiento de las membranas, en particular de productos solubles (SMP) y exopolímeros (EPS) segregados por los microorganismos que dan cohesión a los materiales depositados sobre la superficie de la membrana y aumentan la resistencia hidráulica en el proceso de filtración. Este tipo de análisis permitirá establecer estrategias preventivas y de control del ensuciamiento.
- Identificación de metabolitos intermedios producidos por distintos microorganismos en distintos alimentos, como por ejemplo, de aminos biógenas. Estudio de la evolución de las poblaciones microbianas durante el procesado y conservación en dos productos cárnicos: fresco y sometido a tratamiento térmico.
- Evaluación de la migración global y de compuestos volátiles en un estudio técnico de nuevos envases para su empleo en tratamientos de altas presiones isostáticas en el campo de la alimentación.
- Realización de estudios de metabolómica de compuestos fenólicos en la elaboración de alimentos.



# UNIVERSIDAD DE BURGOS

## VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN

### PARQUE CIENTÍFICO TECNOLÓGICO

- Aplicaciones en estudios de viabilidad y estabilidad de compuestos bioactivos durante el procesado y almacenamiento de productos lácteos
- Caracterización química de lípidos estructurados sintetizados mediante lipasas estereoespecíficas, seguimiento de la fracción caseínica e identificación de péptidos bioactivos en quesos tratados con proteasas microencapsuladas para reducir los tiempos de maduración.
- Análisis de galacto-oligosacáridos (GOS) obtenidos mediante síntesis enzimática.
- Identificación de aminas biogénicas para detección de precursores de enfermedades.
- Metabolómica de compuestos fenólicos y de biomarcadores de estrés oxidativo en muestras de origen vegetal y animal.
- Análisis de flavonoides, sustancias antioxidantes y vitaminas en materias primas, productos alimentarios, productos dietéticos y de régimen, alimentos crudos y alimentos cocinados, de modo que se conozca el aporte real de estas sustancias para los consumidores.
- Análisis de flavonoides, sustancias antioxidantes y vitaminas en materias primas, productos alimentarios, productos dietéticos y de régimen, alimentos crudos y alimentos cocinados.
- Determinación de residuos de antibióticos y otros restos medicamentosos o sus metabolitos presentes en alimentos y potencialmente nocivos en seguridad alimentaria.
- Campo del análisis 'no target' y la caracterización de productos por su "huella espectral.
- Identificar inequívocamente los analitos en el ámbito de la Seguridad alimentaria. Análisis de residuos veterinarios, pesticidas y monómeros y aditivos en alimentos.
- Identificación y caracterización de intermedios y productos de Síntesis Orgánica así como el cálculo de masas exactas de los nuevos compuestos sintetizados.
- Separación, identificación y caracterización de mezclas complejas de compuestos orgánicos e incluso de enantiómeros empleando columnas con relleno quirral.
- Realización de análisis para la determinación de contaminantes en aguas o suelos.



# UNIVERSIDAD DE BURGOS

## VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN

### PARQUE CIENTÍFICO TECNOLÓGICO

- Separación e identificación de componentes de plásticos generalmente no volatilizables, como colorantes, plastificantes, antioxidantes y estabilizadores UV, entre otros ejemplos.
- Detección y discriminación de contaminantes y metabolitos orgánicos de alto impacto medioambiental.
- Análisis de compuestos orgánicos en muestras de carbonatos espeleotémicos (estalagmitas).
- En el campo de la Paleontología, es interesante la potencia de un LC/MS en términos de identificación de proteínas en un enfoque proteómico. La Proteómica se utiliza frecuentemente en estudios de paleontología. En éste enfoque la identificación de las proteínas se hace en base a la identificación de la compleja mezcla de péptidos resultantes de una digestión triptica de las proteínas.

