



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2023/2024



Facultad de Ciencias

PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO/EMPRESA

DATOS BÁSICOS DEL TFG

| | | | |
|---------------------------|---|--------------------------|----|
| TÍTULO TFG | Optimización de métodos de espectrometría de masas en tándem (MS/MS) para su aplicación en estudios metabolómicos no dirigidos. | | |
| CÓDIGO TFG ⁽¹⁾ | QA-23/24-16 | TIPOLOGÍA ⁽²⁾ | A2 |

⁽¹⁾ A rellenar por la dirección del dpto que vendrá dado como: código del dpto-Nº de orden (p.e.: QA-01)

⁽²⁾ Al final del documento se encuentran las diferentes tipologías

| | | |
|--------------|---|-------------------------------------|
| OFERTADO POR | Profesor del Departamento | <input checked="" type="checkbox"/> |
| | Profesor del Departamento junto con Empresa o Institución | <input type="checkbox"/> |

DATOS DE LA ENTIDAD (donde se va a realizar el TFG)

| | | | |
|--|--|---------------------|-------|
| CENTRO (Departamento, institución o empresa) | Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, UGR | | |
| DIRECCIÓN POSTAL ⁽³⁾ | Av. Fuentenueva S/N | | |
| LOCALIDAD ⁽³⁾ | Granada | C.P. ⁽³⁾ | 18071 |

⁽³⁾ A rellenar en el caso de realizarse en una empresa

DATOS DEL TUTOR

| TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución) | | | |
|---|--------------------------|--------|-----------------|
| NOMBRE Y APELLIDOS | Antonio Segura Carretero | | |
| DEPARTAMENTO | Química Analítica | | |
| CARGO ⁽⁴⁾ | Catedrático | | |
| TELÉFONO | 958248435 | E-MAIL | ansegura@ugr.es |

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

| TUTOR 2 | | | |
|--|--------------------------|--------|-----------------------|
| NOMBRE Y APELLIDOS | Álvaro Fernández Ochoa | | |
| DEPARTAMENTO | Química Analítica | | |
| CARGO ⁽⁴⁾ | Investigador Posdoctoral | | |
| TELÉFONO | 617000980 | E-MAIL | alvaroferochoa@ugr.es |
| TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución) | | | |
| NOMBRE Y APELLIDOS | | | |
| TITULACIÓN | | | |
| TELÉFONO | | E-MAIL | |

⁽⁴⁾ Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

Introducción.

Este Trabajo Fin de Grado se enmarca en el área de la metabolómica, cuyo objetivo es el análisis exhaustivo de muestras biológicas con la finalidad de lograr la completa caracterización y cuantificación de todos los compuestos presentes en el metaboloma. El estudio del metaboloma es un reto analítico de gran envergadura debido a que este contiene un enorme número de componentes procedentes de diferentes familias de metabolitos (aminoácidos, lípidos, ácidos nucleicos, nucleótidos, etc.), los cuales presentan una alta diversidad en cuanto a sus propiedades físicas y químicas, pudiendo encontrarse además en un amplio rango de concentraciones. De hecho, el gran reto actual del área de la metabolómica reside en la etapa de identificación de los metabolitos. Para llevar a cabo esta etapa, el desarrollo de métodos analíticos basados especialmente en técnicas analíticas sofisticadas de última generación, principalmente la espectrometría de masas, así como la expansión de las bases de datos (HMDB, MONA, Massbank, KEGG, etc) están jugando un papel fundamental para el avance de este campo. Para lograr la identificación mediante métodos basados en espectrometría de masas de alta resolución, es necesario el desarrollo y optimización de los métodos de fragmentación cuando se utilizan analizadores en tándem (Q-TOF, Q-Orbitrap), que logren obtener espectros de MS con la suficiente calidad para su comparación con la información disponible en bases de datos.

Objetivos.

El objetivo principal de este trabajo fin de grado es el desarrollo y optimización de métodos de fragmentación basados en espectrometría de masas de alta resolución (Q-TOF) que permitan identificar el número máximo posibles de metabolitos presentes en muestras biológicas sanguíneas haciendo uso de bases de datos (MONA, MassBank, HMDB, etc.).

Resumen de los trabajos a realizar por el estudiante/Plan de trabajo.

- 1) Tratamiento de las muestras de plasma sanguíneo para su análisis mediante HPLC-ESI-QTOF-MS/MS. Etapa de precipitación de proteína mediante disolventes orgánicos.
- 2) Optimización de los métodos de fragmentación mediante Q-TOF. Manejo de métodos de fragmentación data-dependent acquisition (DDA). Optimización de las reglas de exclusión para la realización de la fragmentación, nivel de ruido, velocidad de fragmentación, energías de colisión, resolución del cuádruplo, rango de masas, etc.
- 3) Análisis de las muestras de plasma sanguíneo mediante los diferentes métodos propuestos de HPLC-ESI-QTOF-MS/MS (DDA).
- 4) Procesamiento de datos y uso de bases de datos (MassBank, MONA, HMDB, etc.) para la obtención de los resultados.
- 5) Interpretación de los resultados.

Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de las propuestas del departamento en formato pdf (Word transformado en pdf, NO escaneado) al correo: gradoquimica@ugr.es. El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.

TIPOLOGÍA⁽²⁾

- A.** Trabajos de investigación con orientación básica o aplicada, cuya temática se relacione con los contenidos de la titulación, como:
- A1.** Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado, a partir de material ya disponible en los Centros.
 - A2.** Trabajos experimentales, de toma de datos de campo, de laboratorio, etc.
 - A3.** Elaboración de guías prácticas relacionadas con la temática del Grado.
- B.** Trabajos científico-técnicos representativos del ejercicio profesional para el que capacita la titulación, como:
- B1.** Elaboración de un informe o un proyecto de naturaleza profesional.
 - B2.** Elaboración de un plan de empresa.
 - B3.** Simulación de encargos profesionales.
- C.** Trabajos bibliográficos (**C**)