



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Evaluación de la cromatografía de interacción hidrofílica (HILIC) acoplada a la espectrometría de masas de alta resolución (HRMS) para estudios de metabolómica en toxicología

Descripción general (resumen y metodología):

Aunque todavía es una metodología emergente en el área de la toxicología, existe un interés creciente en la metabolómica como herramienta para llevar a cabo la evaluación de riesgos químicos. La metabolómica es el estudio a gran escala de procesos químicos en fluidos biológicos, células, tejidos u organismos que involucran moléculas pequeñas (<1500 Da) conocidas como metabolitos, e incluyen compuestos naturales y sustancias exógenas como los contaminantes ambientales. Proporciona la información más completa sobre la respuesta del organismo a una exposición química ('huella metabólica'), pues el metaboloma constituye la capa biológica más próxima al fenotipo y, por tanto, a la fuente de exposición química. Alteraciones en los niveles de concentración de ciertos metabolitos pueden relacionarse directamente con observaciones funcionales de toxicidad o con la adaptación de un organismo.

La mayor parte de los estudios metabolómicos basados en un flujo de análisis de cromatografía de líquidos acoplada a la espectrometría de masas de alta resolución (LC-HRMS) utilizan la cromatografía de líquidos en fase reversa (RPLC) como modalidad de LC. Si bien es cierto que los métodos RPLC permiten una cobertura amplia del metaboloma, estos proporcionan un bajo rendimiento para la determinación de metabolitos polares. Además, la detección también puede ser problemática debido a fenómenos de supresión de la ionización. En los últimos años, la cromatografía de interacción hidrofílica (HILIC) ha surgido como técnica alternativa a la RPLC para el análisis de moléculas polares, con gran impacto en los estudios del metaboloma. Sin embargo, los métodos basados en separaciones HILIC aún se enfrentan a varios problemas relacionados con la forma de pico y la ionización de compuestos, lo que limita el procesamiento automático de los datos generados, tal y como se lleva a cabo en los estudios de metabolómica. Por lo tanto, todavía es necesaria más investigación para mejorar el rendimiento y la robustez de los métodos HILIC en metabolómica.

El objetivo principal de este Trabajo Fin de Grado es la evaluación de diferentes condiciones de HILIC-HRMS para la determinación de moléculas representativas pertenecientes a diferentes rutas metabólicas del ser humano.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

Los objetivos específicos de este Trabajo Fin de Grado son los siguientes:

- Revisión bibliográfica del tema planteado con objeto de conocer los antecedentes de la cromatografía de interacción hidrofílica líquidos acoplada a la espectrometría de masas de alta resolución con aplicaciones en metabolómica.
- Evaluación de diferentes variables que influyen en la separación de los analitos en estudio mediante cromatografía de interacción hidrofílica.
- Selección de las condiciones óptimas para la separación de un amplio número de metabolitos mediante cromatografía de interacción hidrofílica, su ionización mediante una fuente de ionización por electrospray, y su detección mediante espectrometría de masas de alta resolución.

- Caracterización de los parámetros de calidad del método analítico seleccionado (linealidad, límites de detección, etc.).

Bibliografía básica:

- A. Pielaat, G.C. Barker, et al. (2013) EFSA Supporting Publications, 10:EN-145.
- EFSA Scientific Committee (2014) EFSA Journal, 12:3638.
- EFSA Scientific Committee, et al. (2018) EFSA Supporting publication, EN-1512.
- D.-Q. Tang, L. Zou, et al. (2014) Mass Spectrom. Rev., 35:574-600.
- D. Rojo, C. Barbas, F.J. Rupérez (2012) Bioanalysis, 4:1235-1243.
- F. Hosseinkhani, et al. (2022) Metabolites, 12:165.
- I. Kohler, D.J.E. Derks, M. Giera (2016) LC-GC Eur., 29:60-75.
- M. Hernández-Mesa, B. Le Bizec, G. Dervilly (2021) Anal. Chim. Acta, 1154:338298.
- M. Hernández-Mesa, et al. (2020) in: Encyclopedia of Analytical Chemistry: Applications, Theory and Instrumentation (John Wiley& Sons, Ltd). DOI: 10.1002/9780470027318.a9520.pub2.
- L. Narduzzi, A.-L. Royer, E. Bichon, Y. Guittou, et al. (2019) Metabolites, 9:292.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: MAYKEL HERNÁNDEZ MESA

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA ANALÍTICA

Correo electrónico: maykelhm@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: