



Simposio Internacional / International Symposium:

Segundo Simposio Internacional Julio Palacios

The Second Julio Palacios International Symposium

A Coruña, 11 y 12 de julio de 2018 / July 11 and 12, 2018

ABSTRACT

Identificación de isómeros iónicos mediante espectrometría de movilidad diferencial y activación IR

Philippe Maître

Paris-Sud University.

Se ha demostrado que los α -aminoácidos (AA) comunes y sus derivados catabólicos constituyen una clase de biomarcadores para el diagnóstico precoz de enfermedades como el cáncer. En el marco de las técnicas de metabolómica basadas en la espectrometría de masas de tándem, se pueden emplear diferentes estrategias para la etapa de separación, a fin de minimizar el ruido químico y contribuir a la resolución de especies isobáricas o isoméricas. En este contexto, la espectrometría de movilidad iónica representa una alternativa interesante, o enfoque complementario, a la cromatografía en fase condensada que requiere una preparación previa o posterior a la columna. Se propone investigar el rendimiento de la espectrometría de movilidad diferencial de iones (DIMS) acoplado a la espectrometría de masas de tándem para la separación de los 20 AA comunes. Con la excepción de Leucina / Isoleucina, todos los pares de AA se pueden separar utilizando N₂ como gas portador. La resolución pico a pico para cada combinación de pares de iones AA se deriva sistemáticamente para los valores de intensidad de campo eléctrico, y resulta que aproximadamente un 80% puede separarse de la línea de base. El potencial del experimento DIMS-MS / MS en combinación con la activación infrarroja también se utiliza para la separación de sus isómeros e identificación de la sarcosina, un biomarcador potencial del cáncer de próstata. La separación basal de la sarcosina protonada de los isómeros de α - y β -alanina puede lograrse fácilmente usando solo N₂ como gas portador. La identificación del pico DIMS se realiza usando un modo de activación específico de isómero, donde los iones seleccionados por DIMS y su masa se irradian a las longitudes de onda seleccionadas, lo que permite la fragmentación específica a través de un proceso de disociación multifotónica por radiación infrarroja (IRMPD). En base a la comparación de los espectros IR de los tres isómeros, mostramos

que se puede reducir la presencia específica de las dos α - y β -alaninas protonadas, permitiendo así una identificación clara del pico de la sarcosina. También se demuestra que los espectros DIMS-MS / MS (IRMPD) en la región del enlace carboxílico C=O permiten la resolución de picos superpuestos.

*Todos los derechos de propiedad intelectual son del autor. Queda prohibida la reproducción total o parcial de la obra sin autorización expresa del autor.

© FUNDACIÓN RAMÓN ARECES. Todos los derechos reservados.

**All intellectual property rights belong to the author. Total or partial reproduction of the work without express permission of the author is forbidden. © FUNDACIÓN RAMÓN ARECES. All rights reserved.*