



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Evaluación de software de procesamiento de datos de HPLC-IMS-MS para análisis metabolómicos no dirigidos.

Descripción general (resumen y metodología):

Este Trabajo Fin de Grado se enmarca en el área de las técnicas analíticas, con especial énfasis en la espectrometría de masas (MS). A pesar del gran potencial de la espectrometría de masas acoplada a cromatografía de líquidos (LC), esta plataforma analítica presenta ciertas limitaciones para la caracterización completa de los compuestos presentes en muestras complejas, como las vegetales o matrices biológicas. Entre estas limitaciones se encuentra la dificultad para resolver analitos con propiedades fisicoquímicas similares, como isómeros, enantiómeros o compuestos isobáricos, que pueden presentar tiempos de retención y relaciones masa/carga (m/z) muy similares.

Para superar estas limitaciones, en los últimos años se ha incorporado una tercera dimensión de separación mediante espectrometría de movilidad iónica (IMS), generando así la plataforma LC-IMS-MS. Esta técnica permite mejorar la resolución analítica al introducir el parámetro de movilidad iónica, lo que resulta especialmente útil en estudios metabolómicos no dirigidos de matrices complejas. Sin embargo, la inclusión de esta nueva dimensión analítica implica también un aumento significativo en la complejidad de los datos generados, lo que plantea nuevos retos en el desarrollo y optimización de estrategias de procesamiento de datos, propiciando la aparición reciente de nuevos software para su procesamiento.

En este contexto, este Trabajo Fin de Grado tiene como finalidad evaluar metodologías de tratamiento de datos basados en HPLC-ESI-IMS-QTOF-MS para su aplicación en análisis no dirigidos de muestras vegetales y/o biológicas. El estudio incluirá la selección de muestras, su tratamiento previo, el análisis instrumental y la comparación de resultados obtenidos mediante distintos enfoques de procesamiento de datos, tanto con software comercial como con herramientas de software libre. Se prestará especial atención a las etapas de extracción automática de señales, anotación y visualización de datos metabolómicos, así como al impacto de la movilidad iónica sobre la cobertura metabólica y la capacidad de resolución.

Tipología: Trabajos experimentales, de toma de datos de campo o de laboratorio.

Objetivos planteados:

El objetivo principal del TFG es evaluar estrategias de procesamiento de datos basadas en HPLC-ESI-IMS-QTOF-MS para su aplicación en análisis no dirigidos de muestras vegetales y/o biológicas. Para alcanzar dicho objetivo se plantean los siguientes objetivos específicos:

- 1)• Seleccionar muestras adecuadas (extractos vegetales y/o matrices biológicas) como modelo para el estudio.
- 2)• Tratar las muestras seleccionadas para su análisis mediante un enfoque no de metabolómica no dirigido.
- 3)• Analizar las muestras mediante la plataforma analítica HPLC-ESI-IMS-QTOF-MS.
- 4)• Implementar, comparar y optimizar estrategias de procesamiento de datos utilizando tanto software comercial como herramientas de software libre, evaluando su eficacia en términos de cobertura metabólica, resolución y facilidad de interpretación.

Bibliografía básica:

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Se recomienda haber cursado y superado la asignatura Química Analítica IV.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: ÁLVARO FERNÁNDEZ OCHOA

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA ANALÍTICA

Correo electrónico: alvaroferochoa@ugr.es

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

Nombre y apellidos: ANTONIO SEGURA CARRETERO

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA ANALÍTICA

Correo electrónico: ansegura@ugr.es

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:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: