

Programa Analítico de Disciplina

BQI 701 - Espectrometria de Massas Aplicada à Análise de Biomoléculas

Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular - Centro de Ciências Biológicas e da Saúde

Catálogo: 2024

Número de créditos: 4

Carga horária semestral: 60h

Carga horária semanal teórica: 4h

Carga horária semanal prática: 0h

Semestres: I

Ementa

Espectrometria de massas
Analisadores de massas
Técnicas de separação multidimensional e MS
Quantificação de moléculas de baixo peso molecular por MS
Sequenciamento e identificação de peptídeos e proteínas
Quantificação de peptídeos e proteínas por MS
Identificação e quantificação de moléculas de baixo peso molecular por MS
Aplicações no estudo de biomarcadores e fisiologia molecular

Conteúdo

| Unidade | T | P | To |
|--|-----|----|-----|
| 1. Espectrometria de massas 1. Conceitos gerais 2. Relações m/z, massa monoisotópica, massa nominal 3. Distribuição isotópica, resolução, acurácia e precisão 4. Fontes de ionização: MALDI, EI, ESI, APCI, modo de ionização e deconvolução | 4h | 0h | 4h |
| 2. Analisadores de massas 1. Conceitos e parâmetros determinantes de desempenho 2. Tipos de analisadores: quadrupolos (Q), Ion Trap (IT), Tempo de Vôo (TOF) 3. Combinações (MS ⁿ): QQQ e Q-TOF 4. Modos de escaneamentos e aplicações: <i>Product Ion Scan</i> , <i>Precursor Ion Scan</i> , <i>Neutral Loss</i> , MRM | 12h | 0h | 12h |
| 3. Técnicas de separação multidimensional e MS 1. Tipos de acoplagem: direta e indireta 2. Cromatografia líquida: princípios de HPLC e UHPLC 3. Cromatografia gasosa: princípios GC MS, tempo de retenção (RT) e índices de retenção (RI), GC-TOF 4. Preparo das amostras para MS e LC/MS 5. Perfis bidimensionais de dados de LC/MS, <i>Total Ion Chromatogram</i> (TIC), <i>Extracted Ion Chromatogram</i> (XIC) | 8h | 0h | 8h |

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://siadoc.ufv.br/validar-documento> com o código: AX75.A3JI.AUU4

| | | | |
|--|------------|-----------|------------|
| 4. Quantificação de moléculas de baixo peso molecular por MS 1. Relação intensidade do espectro de massas e abundância na amostra 2. Quantificação relativa e quantificação absoluta 3. Normalização, padrões internos e externos | 8h | 0h | 8h |
| 5. Sequenciamento e identificação de peptídeos e proteínas 1. Fragmentação de peptídeos: series a, b e y, interpretação por sequenciamento <i>de novo</i> 2. Métodos computacionais: <i>Peptide Mass Fingerprinting</i> , <i>MS MS Ion Search</i> , <i>de novo sequencing</i> assistido por software; pesquisa de tags parciais contra proteínas homólogas (<i>homology search</i>) 3. Utilização de plataformas computacionais remotas: MASCOT e Peaks 4. Estratégias de validação estatística: FDR (<i>false discovery rate</i>) e Scaffold (peptide prophet e Protein Prophet) | 8h | 0h | 8h |
| 6. Quantificação de peptídeos e proteínas por MS 1. Métodos com marcação isotópica e isobárica: SILAC, ICAT, iTRAQ 2. Métodos sem marcação (label-free): análise do cromatograma dos íons (XIC) e contagem espectral | 4h | 0h | 4h |
| 7. Identificação e quantificação de moléculas de baixo peso molecular por MS 1. Distribuição isotópica e predição de fórmulas química de dados de MS1 e MS2 de alta acurácia 2. Pesquisa contra bibliotecas espectrais: NIST, MassBank, MetFusion 3. Quantificação de moléculas de perfis LC/MS e GC/MS: plataforma XCMS e TargetSearch e TagFinder 4. Plataformas para análise e interpretação de dados de metabolômica | 8h | 0h | 8h |
| 8. Aplicações no estudo de biomarcadores e fisiologia molecular | 8h | 0h | 8h |
| Total | 60h | 0h | 60h |

Teórica (T); Prática (P); Total (To);

BQI 701 - Espectrometria de Massas Aplicada à Análise de Biomoléculas

Bibliografias básicas

| Descrição | Exemplares |
|---|------------|
| Gross, Jürgen H. Mass Spectrometry: A Textbook. 201. Springer 2011 | 0 |
| Hoffmann, Edmond de. Mass spectrometry: principles and applications. ed. Edmond de Hoffmann, Vincent Stroobant. 2008. 3rd | 0 |
| THROCK WATSON and O. DAVID SPARKMAN. INTRODUCTION TO MASS SPECTROMETRY Instrumentation, Applications and Strategies for Data Interpretation. 2007. -- 4th Ed. | 0 |
| Timothy D. Veenstra; John R. Yates. Proteomics for Biological Discovery. 2006 by John Wiley & Sons. 2th Ed | 0 |
| Sudhir Srivastava. Informatics in Proteomics. 2005 by Taylor & Francis Group, LLC. 2th Ed. | 0 |

Bibliografias complementares

Não definidas

Pontos de controle

| Campo | Anterior | Atual |
|----------|---|-------|
| Conteúdo | Há alterações no conteúdo da disciplina | |

Syllabus

BQI 701 - Mass Spectrometry Applied to Biomolecule Analysis

Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular - Centro de Ciências Biológicas e da Saúde

Catalog: 2024

Number of credits: 4

Total hours: 60h

Weekly workload - Theoretical: 4h

Weekly workload - Practical: 0h

Period: I

Content

Mass spectrometry

Mass Analyze

Multidimensional separation techniques and MS

Quantification of low molecular weight molecules by MS

Sequencing and identification of peptides and proteins

Peptides and protein quantification by MS

Identification and quantification of Low molecular weight molecules by MS

Applications in the study of biomarkers and molecular physiology

Course program

| Unit | T | P | To |
|---|-----|----|-----|
| 1. Mass spectrometry 1. Concepts 2. m/z, monoisotopic mass, nominal mass 3. Resolution and accuracy 4. Ionization: MALDI, EI, ESI, APCI | 4h | 0h | 4h |
| 2. Mass Analyze 1. Concepts and performance 2. Mass analyzer types: (Q), Ion Trap (IT), Time of Flight (TOF) 3. Tandem mass spectrometry: (MSn): QQQ; Q-TOF and Ion Trap 3D 4. Scan modes and applications: <i>Product Ion Scan</i> , <i>Precursor Ion Scan</i> , <i>Neutral Loss</i> , MRM | 12h | 0h | 12h |
| 3. Multidimensional separation techniques and MS 1. MS coupling: direct or Indirect 2. Liquid chromatograph: HPLC and UHPLC 3. Gas chromatograph: principles of GC MS and retention time index for GC-TOF 4. Sample preparation for MS and LC/MS 5. LC/MS profiles, <i>Total Ion Chromatogram (TIC)</i> , <i>Extracted Ion Chromatogram (XIC)</i> | 8h | 0h | 8h |
| 4. Quantification of low molecular weight molecules by MS | 8h | 0h | 8h |

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://siadoc.ufv.br/validar-documento> com o código: AX75.A3JI.AUU4

| | | | |
|---|------------|-----------|------------|
| <ul style="list-style-type: none"> 1. Mass Spectrum Intensity and Sample Abundance Relationship 2. Relative and Absolute Quantifications 3. Normalization, Internal and External Standards | | | |
| <p>5. Sequencing and identification of peptides and proteins</p> <ul style="list-style-type: none"> 1. Peptides fragmentation: series a, b e y, de novo sequencing <i>de novo</i> 2. Computational approaches: peptide mass fingerprinting, MS MS <i>Ion search</i>, <i>de novo sequencing assisted</i> by software; MS tag search; homology search 3. Computational packages: MASCOT e peaks 4. Statistic: FDR (<i>false discovery rate</i>) e Scaffold (peptide prophet e protein prophet) | 8h | 0h | 8h |
| <p>6. Peptides and protein quantification by MS</p> <ul style="list-style-type: none"> 1. Isotopic and isobaric labels: SILAC, ICAT, iTRAQ 2. Label-free methods | 4h | 0h | 4h |
| <p>7. Identification and quantification of Low molecular weight molecules by MS</p> <ul style="list-style-type: none"> 1. Isotopic distribution and prediction of molecular formulas from high accuracy MS1 and MS2 data 2. Identification of metabolites by search against spectral libraries: NIST, MassBank 3. Analysis of LC/MS and GC/MS profiles: XCMS, TargetSearch e TagFinder 4. Statistical platforms for analysis and interpretation of metabolomic data | 8h | 0h | 8h |
| <p>8. Applications in the study of biomarkers and molecular physiology</p> | 8h | 0h | 8h |
| Total | 60h | 0h | 60h |

Theoretical (T); Practical (P); Total (To);

BQI 701 - Mass Spectrometry Applied to Biomolecule Analysis

Fundamental references

| Description | Copies |
|---|--------|
| Gross, Jürgen H. Mass Spectrometry: A Textbook. 201. Springer 2011 | 0 |
| Hoffmann, Edmond de. Mass spectrometry: principles and applications. ed. Edmond de Hoffmann, Vincent Stroobant. 2008. 3rd | 0 |
| THROCK WATSON and O. DAVID SPARKMAN. INTRODUCTION TO MASS SPECTROMETRY Instrumentation, Applications and Strategies for Data Interpretation. 2007. -- 4th Ed. | 0 |
| Timothy D. Veenstra; John R. Yates. Proteomics for Biological Discovery. 2006 by John Wiley & Sons. 2th Ed | 0 |
| Sudhir Srivastava. Informatics in Proteomics. 2005 by Taylor & Francis Group, LLC. 2th Ed. | 0 |

Complementary references

Not defined

Pontos de controle

| Campo | Anterior | Atual |
|----------|---|-------|
| Conteúdo | Há alterações no conteúdo da disciplina | |