



## UNIVERSITÀ DI PISA

# SPETTROMETRIA DI MASSA IN CHIMICA ORGANICA E BIOORGANICA

ANDREA RAFFAELLI

|               |         |
|---------------|---------|
| Academic year | 2022/23 |
| Course        | CHIMICA |
| Code          | 104CC   |
| Credits       | 3       |

|   |         |         |       |                  |
|---|---------|---------|-------|------------------|
| Modules   | Area    | Type    | Hours | Teacher(s)       |
| SPETTROMETRIA DI<br>MASSA IN CHIMICA<br>ORGANICA E<br>BIOORGANICA | CHIM/06 | LEZIONI | 24    | ANDREA RAFFAELLI |

### Obiettivi di apprendimento

#### Conoscenze

Lo studente acquisirà conoscenze di base sul funzionamento di uno spettrometro di massa e, più in particolare, sulle informazioni che sono ottenibili da uno spettro di massa dalla sua corretta interpretazione.

Lo studente acquisirà conoscenze sull'uso della spettrometria di massa per l'analisi quantitativa, più in particolare sulla determinazione di sostanze presenti in tracce in miscele complesse

Nella parte finale, lo studente verrà aggiornato su recenti sviluppi introdotti nel settore della spettrometria di massa.

#### Modalità di verifica delle conoscenze

Prima dello svolgimento dell'esame orale, il docente sarà a disposizione degli interessati per discussioni atte a verificare l'acquisizione delle conoscenze indicate.

#### Capacità

Lo studente sarà in grado di leggere uno spettro di massa, individuando lo ione molecolare (che fornisce l'informazione sul peso molecolare dell'analita) e interpretando le frammentazioni (che forniscono informazioni strutturali).

#### Prerequisiti (conoscenze iniziali)

Il corso descrive l'impiego della spettrometria di massa nel settore della chimica organica e bio-organica. I processi stessi di frammentazione sono strettamente correlati con le reazioni organiche. Si ritiene quindi opportuna una buona conoscenza di base della chimica organica.

#### Indicazioni metodologiche

Il corso fa uso di lezioni frontali con l'uso di slides power point in inglese. E' prevista inoltre una breve visita a un Centro di Spettrometria di Massa con esercitazione su uno spettrometro.

### Programma (contenuti dell'insegnamento)

- Introduzione alla spettrometria di massa
  - Concetti di base
- Lo spettrometro di massa
  - Tecniche di introduzione del campione
  - Accoppiamento con la gas-cromatografia
  - Ionizzazione mediante elettroni (EI)
  - Analizzatori di massa
  - Rivelatori
- Altre tecniche di ionizzazione in fase gassosa
  - Ionizzazione chimica (CI)
- Tecniche di ionizzazione da fasi condensate
  - Tecniche di desorbimento – MALDI
  - Tecniche di ionizzazione dalla fase liquida
- Accoppiamento con la cromatografia liquida
  - Accoppiamento – perché?
  - Accoppiamento – come?



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

- Tecniche di ionizzazione a pressione atmosferica
  - Electrospray / Ionspray (ESI / ISI)
  - Atmospheric Pressure Chemical Ionization (APCI)
  - Atmospheric Pressure Photoionization (APPI)
- Spettrometria di massa "tandem"
  - Scansione di ioni prodotto
  - Scansione di ioni precursore
  - Scansione per perdita di frammento neutro
  - Monitoraggio di frammentazioni selezionate
- Interpretazione degli spettri di massa
  - Informazioni ottenibili dallo spettro di massa
  - Linee guida per l'interpretazione delle frammentazioni
- Spettrometria di Massa e analisi quantitativa
- Spettrometria di Massa biologica
- Sviluppi recenti

### Bibliografia e materiale didattico

- Robert M. Silverstein et al. – "Identificazione Spettrometrica di Composti Organici" Terza Edizione, CEA 2016.
- Appunti, Articoli di letteratura, Monografie, **Materiale Didattico su e-Learning**.
- **Jurgen H. Gross – "Spettrometria di Massa", Edises, 2016.**
- Cappiello (Ed) – "Advances in LC-MS Instrumentation", Elsevier, 2007. (per la parte di spettrometria di massa "avanzata", ossia LC-MS, ESI, APCI, APPI, sviluppi recenti).
- de Hoffmann, Stroobant – "Mass Spectrometry", 3a Edizione, Wiley, 2009.

### Modalità d'esame

- L'esame prevede una prova orale consistente in:
  - un colloquio tra il candidato e il docente, o anche tra il candidato e altri collaboratori del docente titolare.
  - durante la prova orale potrà essere richiesto al candidato di risolvere anche problemi/esercizi scritti, davanti al docente.
  - la durata media del colloquio è compresa fra i 15 e i 30 minuti.
- La commissione d'esame vedrà un commissario che affianca il docente.
- La prova orale è superata se il candidato risponderà in maniera soddisfacente alle domande che si susseguono nel corso del colloquio.

Ultimo aggiornamento 29/11/2022 15:33