

Студијски програм/студијски програми: Општа хемија-Модул општа хемија			
Врста и ниво студија: Дипломске академске студије			
Назив предмета: Масена спектрометрија у органској хемији			
Наставник за предавања: Марковић З. Дејан			
Наставник /сарадник (за вежбе): Јовановић П. Олга			
Наставник /сарадник (за ДОН):			
Статус предмета: Изборни			
Број ЕСПБ: 8			
Услов:			
Циљ предмета			
Упознавање студента са основама и модерним применама масене спектрометрије			
Исход предмета			
Оспособљавање студента за интерпретацију масених спектра и експериментални рад на GC-MS-у			
Садржај предмета			
<i>Теоријска настава</i>			
Хемија јона у гасној фази: Теорија квази-равнотеже (QET). Јонизација (електронски снап и хемијска). Вертикални прелазни. Ефикасност јонизације и јонизациони пресек. Унутрашња енергија и даља судбина јона. Константе брзине на основу QET. Стабилни, метастабилни и нестабилни јони. Активациона енергија повратне реакције. Изотопни ефекти. Одређивање јонизационих енергија. Тандемска масена спектрометрија.			
Изотопи: Изотопска класификација елемената. Израчунавање изотопске дистрибуције. Тачна маса и висока резолуција. Резолуција и изотопски профили.			
Начини увођења узорка у масени спектрометар: Директно увођење. Membrane Inlet Mass Spectrometry, MIMS. Гасна хроматографија масена спектрометрија, GC-MS. Течна хроматографија-масена спектрометрија: Moving Belt, Direct Liquid Introduction (DLI), Particle Beam, Thermospray (TSP), Plasmaspray, Supercritical Fluid Chromatography-Mass Spectrometry (SFC-MS), Capillary Electrophoresis-Mass Spectrometry (CE-MS).			
Раздвајање и детекција јона: Time-of-Flight (TOF) инструменти. Магнетни секторни масени спектрометар. Fourier Transform Mass Spectrometry (FT-MS). Линеарни и тродимензионални квадруполни анализатори (јон трап). Детектори.			
Електронска јонизација и алтернативни начини јонизације: Електронски удар (EI). Хемијска јонизација (CI). Field Ionization (FI). Field Desorption (FD). Fast Atom Bombardment (FAB). Matrix-Assisted Laser Desorption/Ionization (MALDI). Atmospheric Pressure Chemical Ionization (APCI).			
Основна практична правила и приступ интерпретацији масених спектра: Молекулски јон. Одређивање елементног састава јона на основу изотопног профила. Фрагментни јони. Библиотеке масених спектра. Коришћење додатних информација у интерпретацији масених спектра. Шема фрагментације.			
Фрагментација органских јона и интерпретација ЕИ масених спектра: Кидање сигма везе. Алфа-раскидање. Дистонични јони. Кидање бензилних веза. Кидање алилних веза. Кидање неактивираних веза. McLafferty фрагментација. Retro-Diels-Alder-ова реакција. елиминација угљенмоноксида. Термална деградација наспрам фрагментације јона. Губитак алкена из онијум јона. Комплекси јон-неутрална честица. Орто елиминација. Хетероциклична једињења. Општа усмерења у интерпретацији.			
Основне фрагментације важнијих класа органских једињења: Алкани. Алкени и диени. Алкени. Алициклични угљоводоници. Ароматични угљоводоници. Алкохоли, феноли и тиоли. Етри и сулфиди. Амине и фосфини. Алкил- и арил-халогени. Карбонилна једињења. Карбоксилне киселине и деривати. Нитрили, изонитрили, нитро-једињења, хидразини, оксими и диазо-једињења. Сулфоксиди, сулфони и сулфокиселине. Елементно-органска једињења. Аминокиселине, пептиди и протеини. Нуклеинске киселине.			
<i>Практична настава: Вежбе</i>			
Рад на GC-MS-у. Интерпретација масених спектра органских (непознатих) једињења. Симулација масених спектра. Формирање базе података масених спектра. Референтне базе. Деконволуција масених скенова и смисао компоненте. Профилирање сложених смеша помоћу масене спектрометрије. Коришћење програма AMDIS.			
Литература			
Gross, J.H., Mass Spectrometry: A Textbook, Springer, Berlin-Heidelberg, 2004.			
Број часова активне наставе			Остали часови
Предавања: 45	Вежбе:	Други облици наставе: 30	
			Студијски истраживачки рад:
Методе извођења наставе: Интерактивна предавања, теоријске и експерименталне вежбе, домаћи задаци, семинарски рад, панел дискусије			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	10	писмени испит	30
практична настава	10	усмени испит	10
колоквијуми	30		

семинар	10		
---------	----	--	--