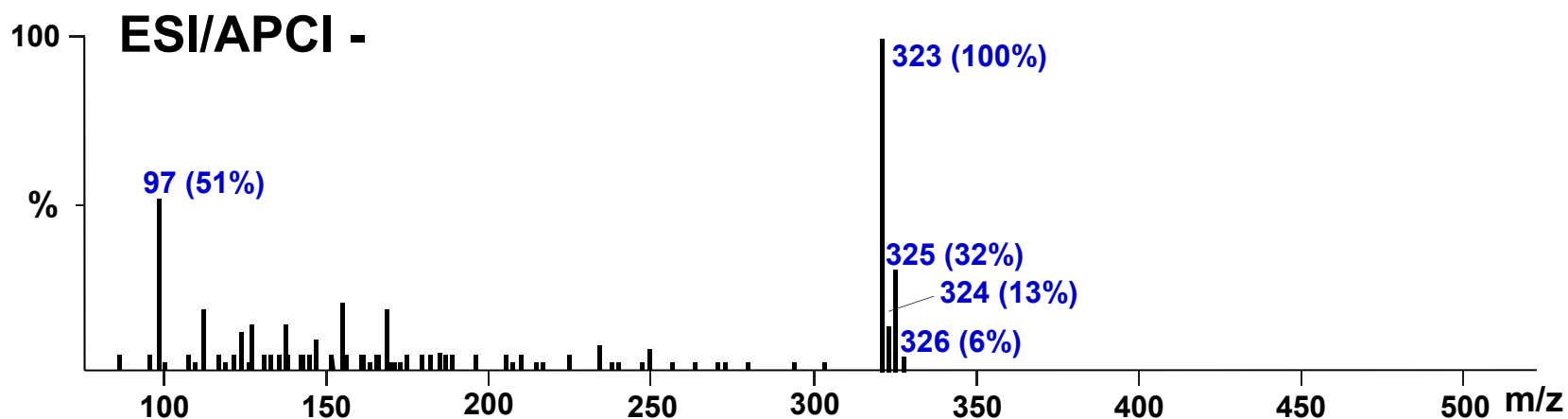
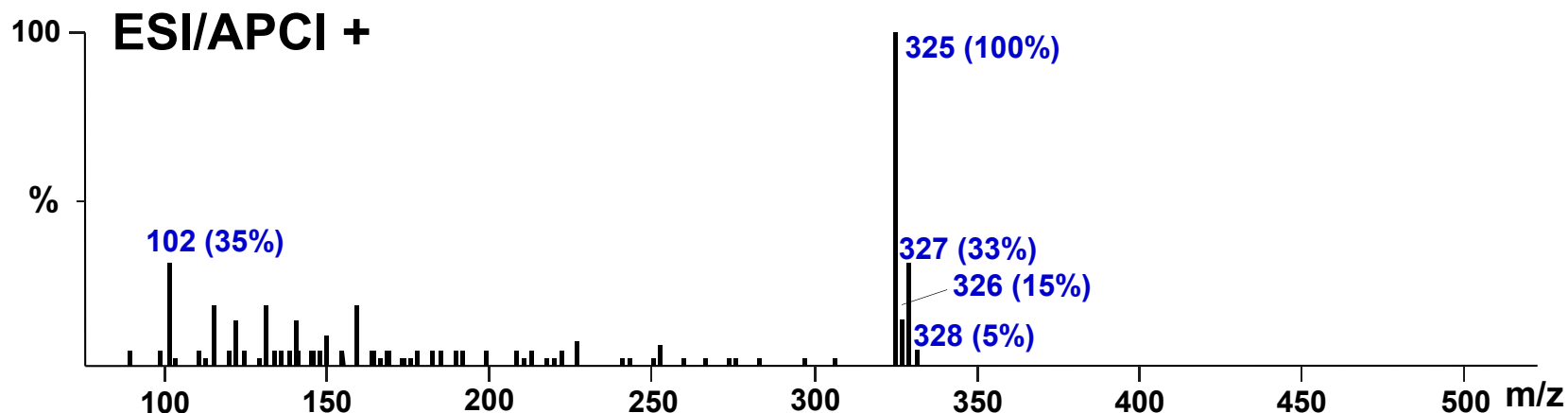
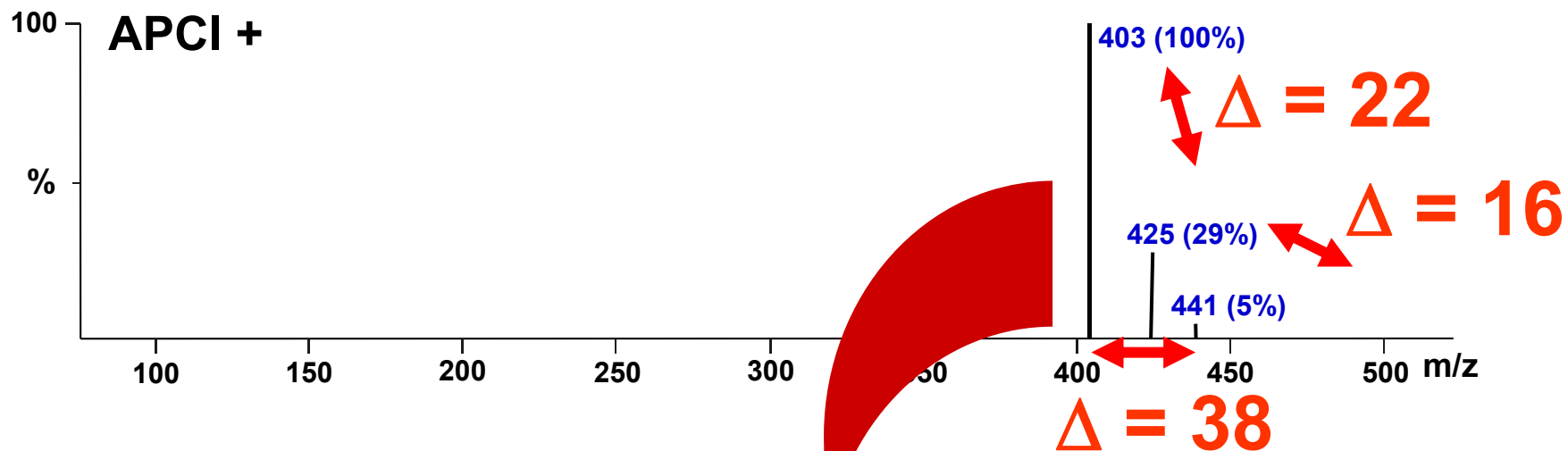


# No. 1- určete MW, vysvětlení izotopů

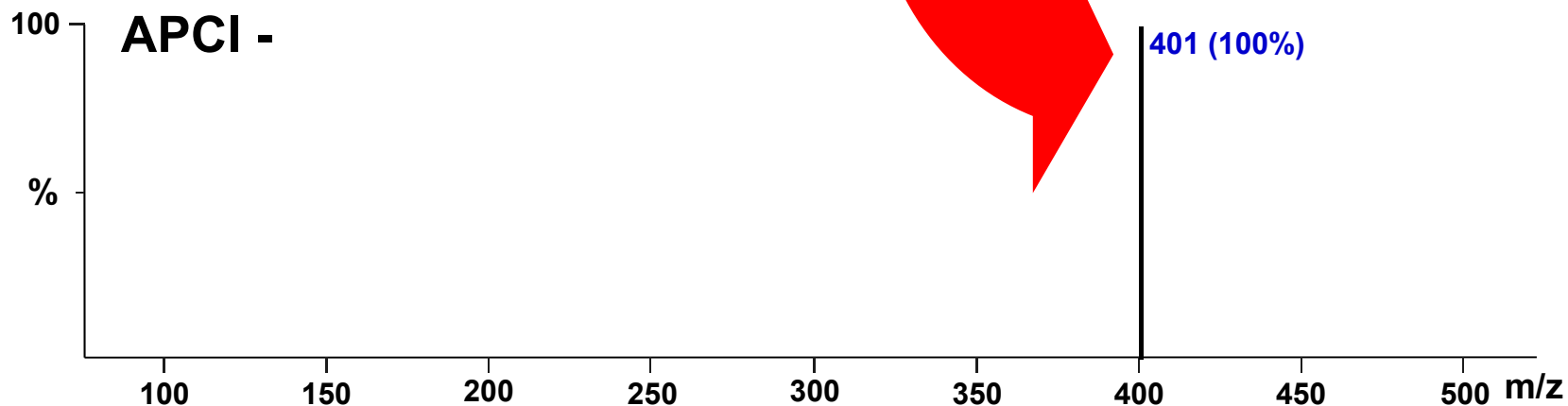


- šum bude v dalších spektrech pro jednoduchost zanedbán
- izotopické píky nebudou většinou zakresleny

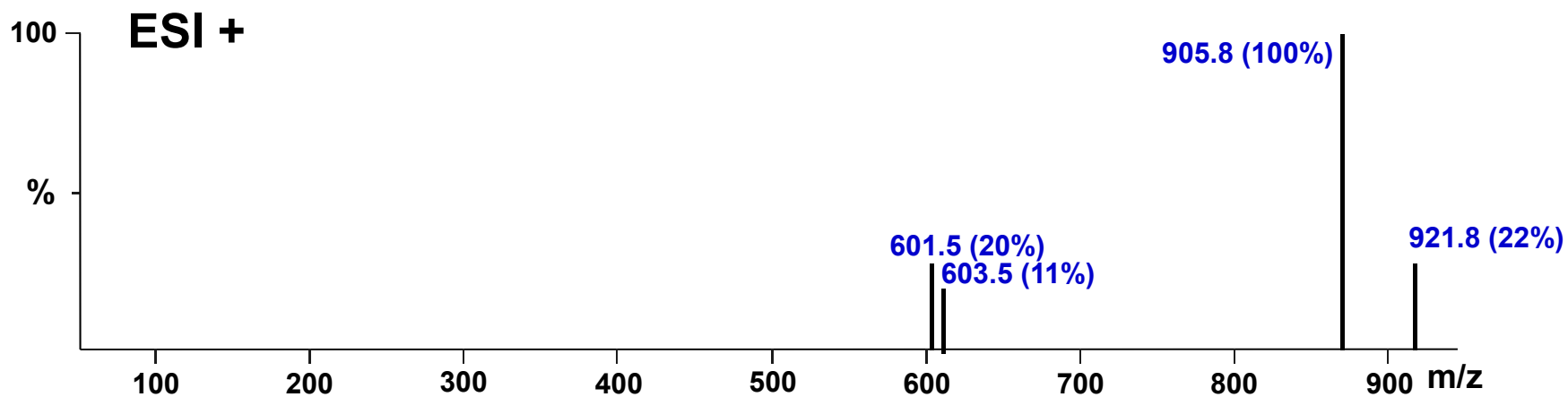
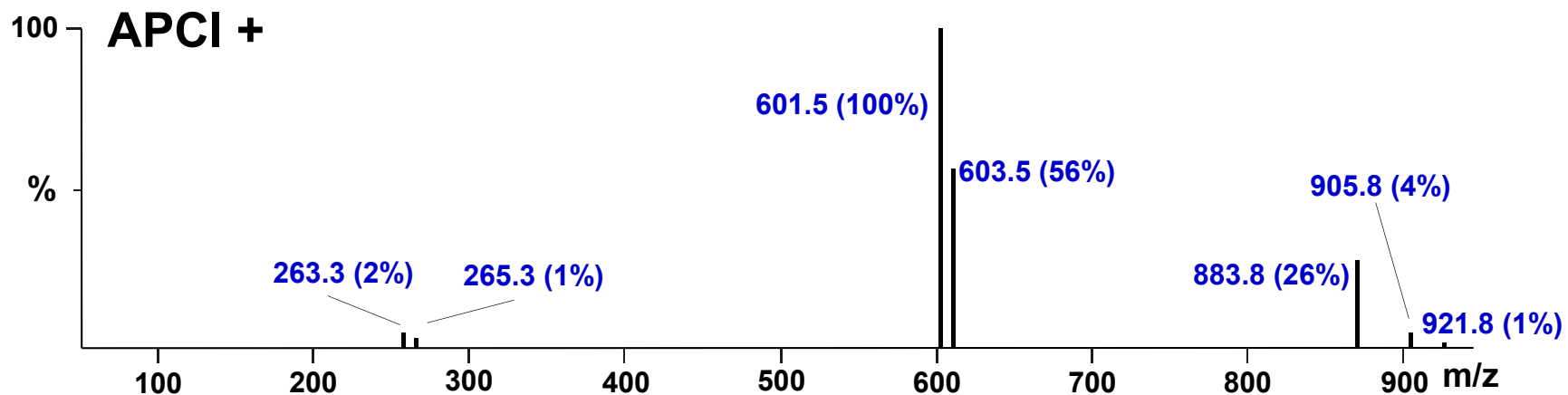
## No. 2 - určete MW, popište ionty



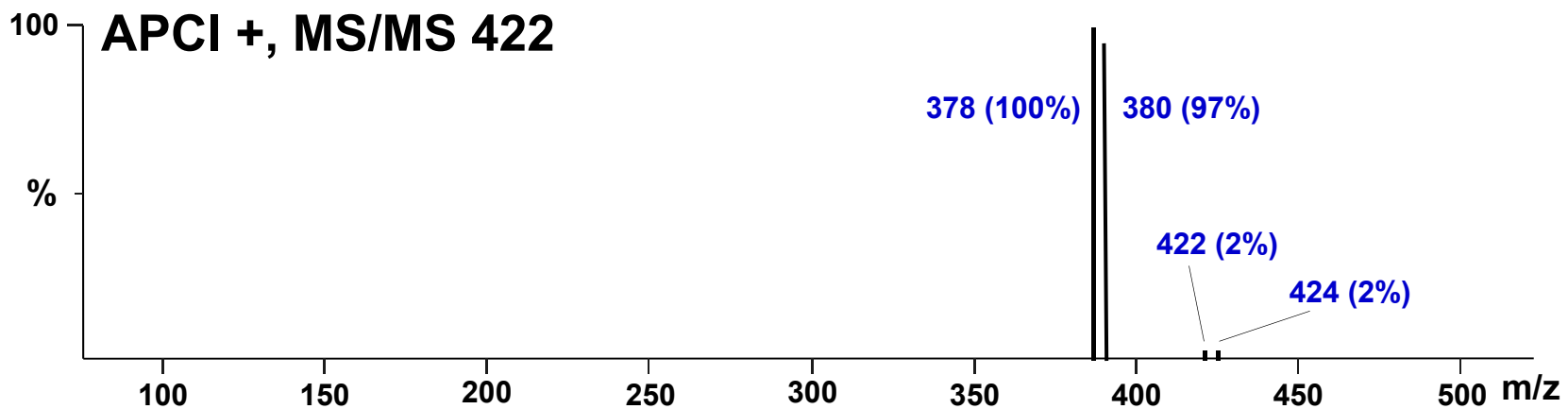
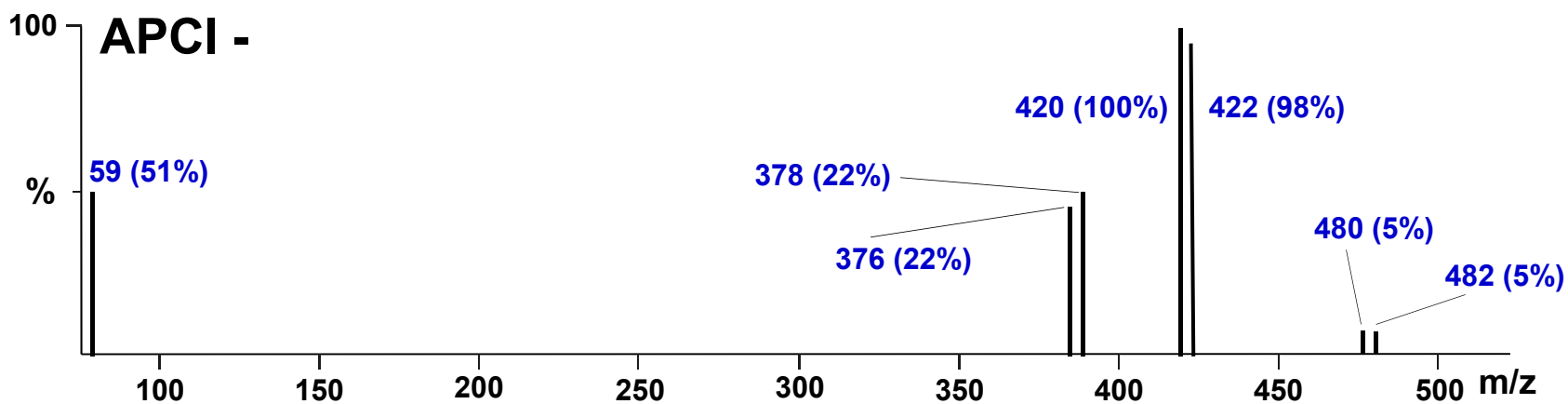
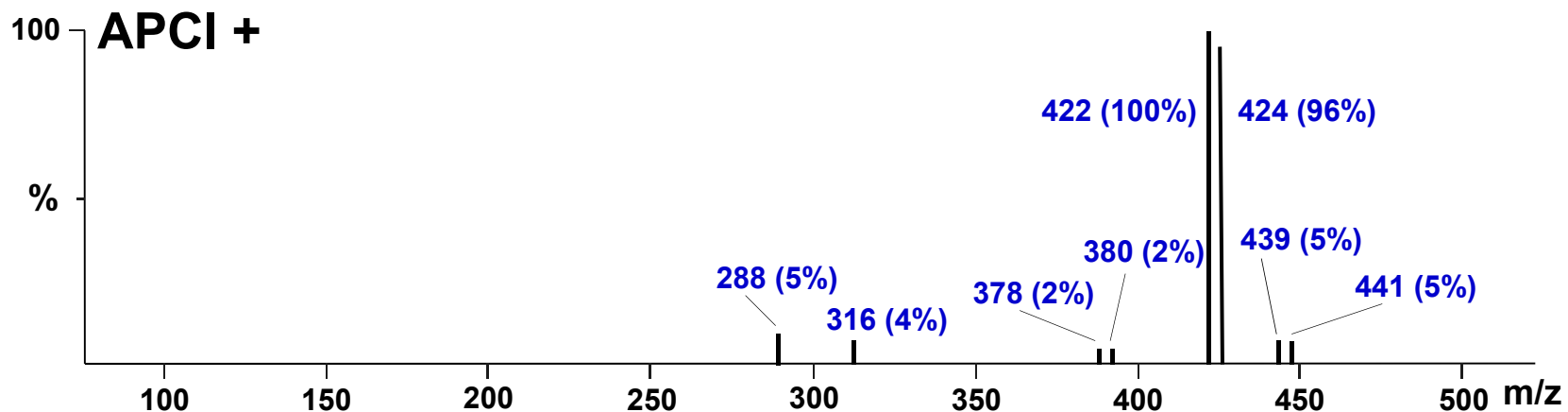
**Úkol:** jaké změny očekáváte po přidavku 5 mM octanu amonného do mobilní fáze



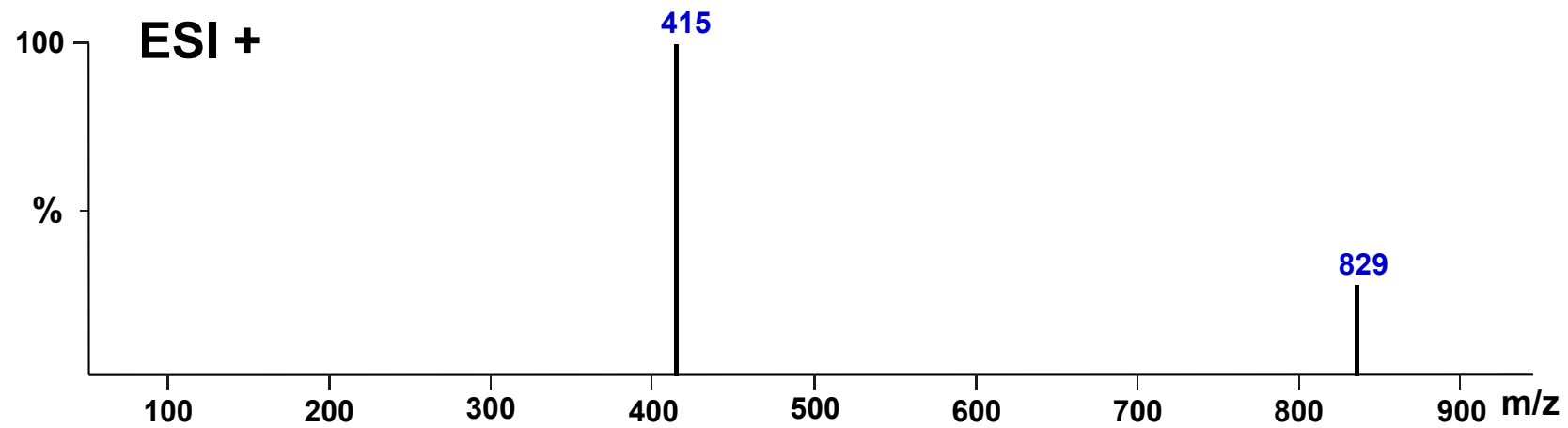
## No. 3 - určete MW, ionizační mód, popište ionty



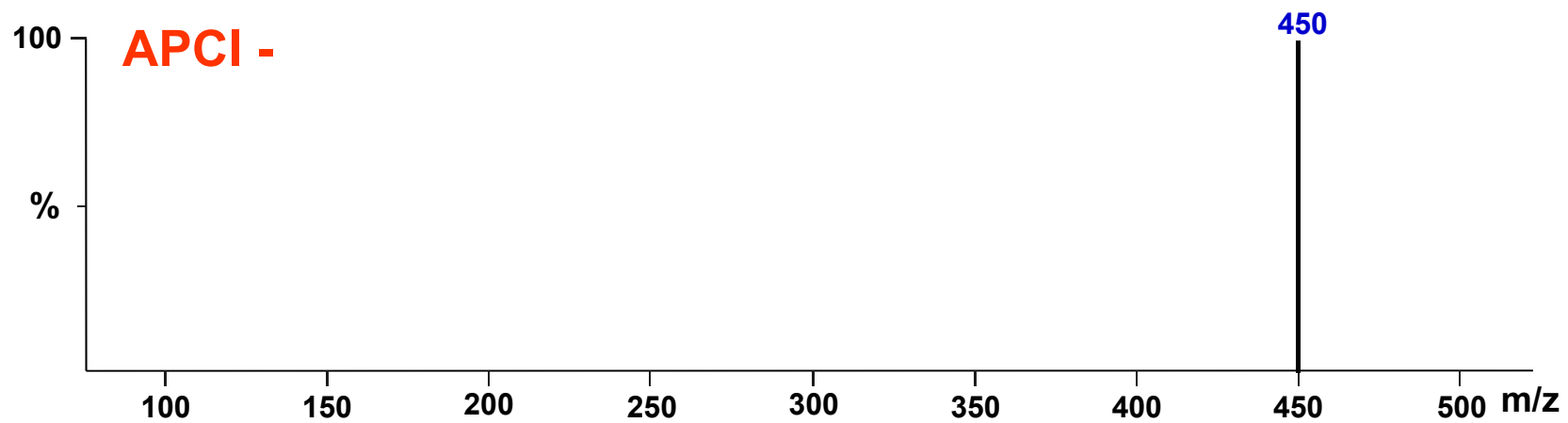
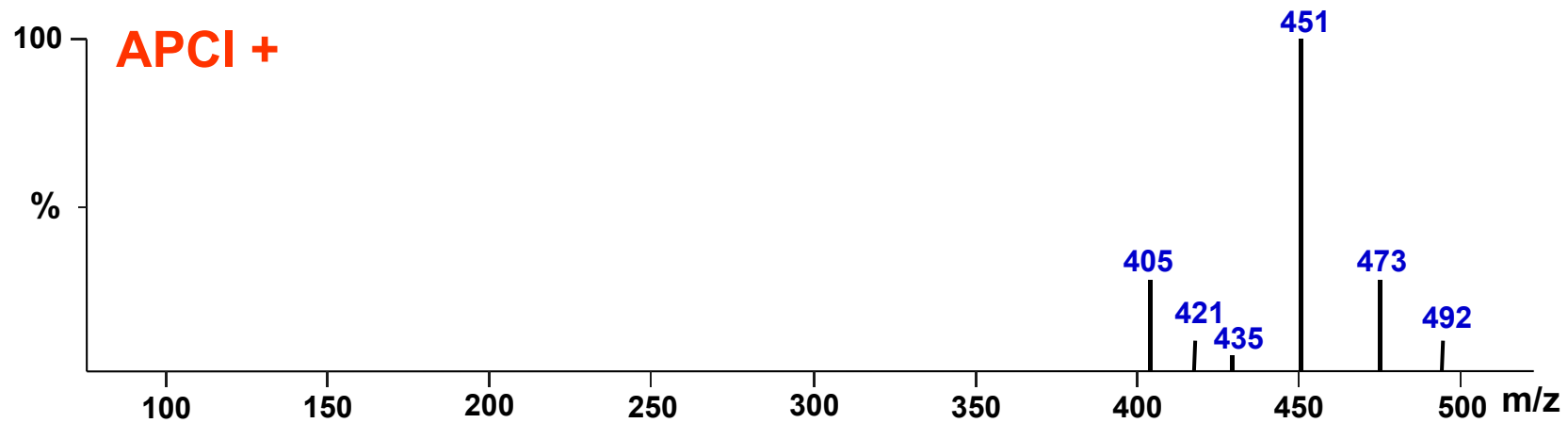
# No. 4



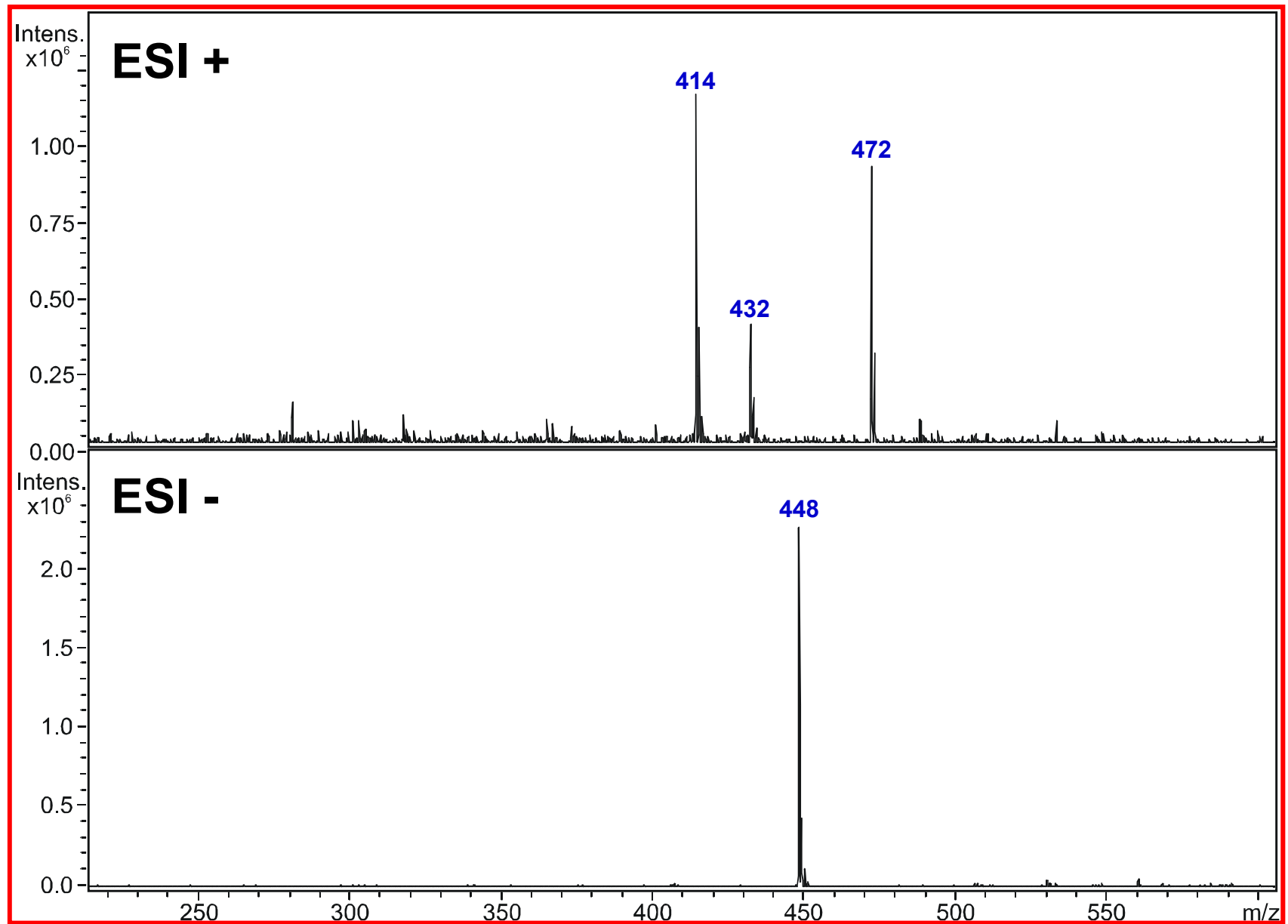
# No. 5 - určete MW



# No. 6 - určete MW a další strukturní informace



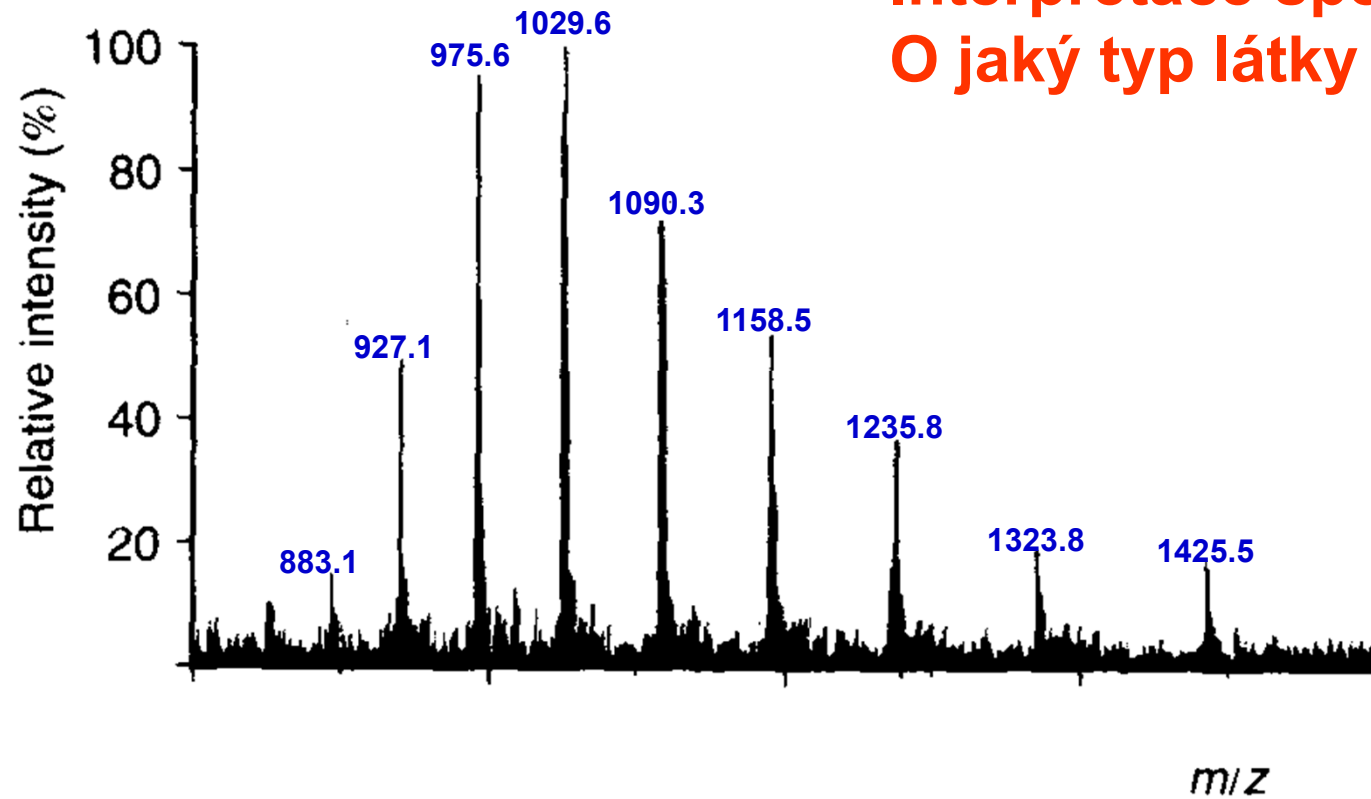
# No. 7 - určete MW a popište ionty



# No. 8

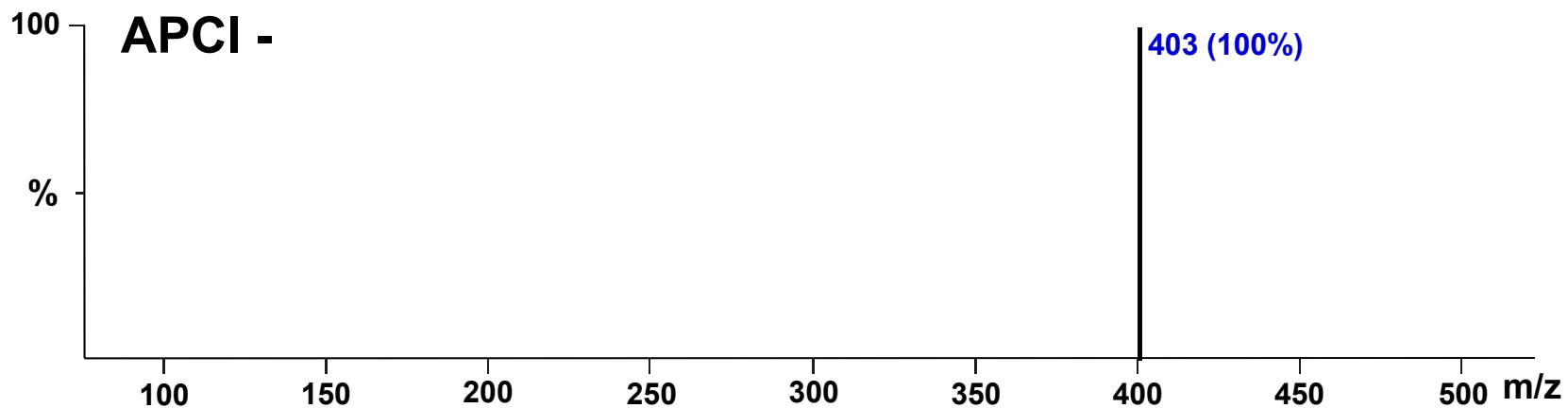
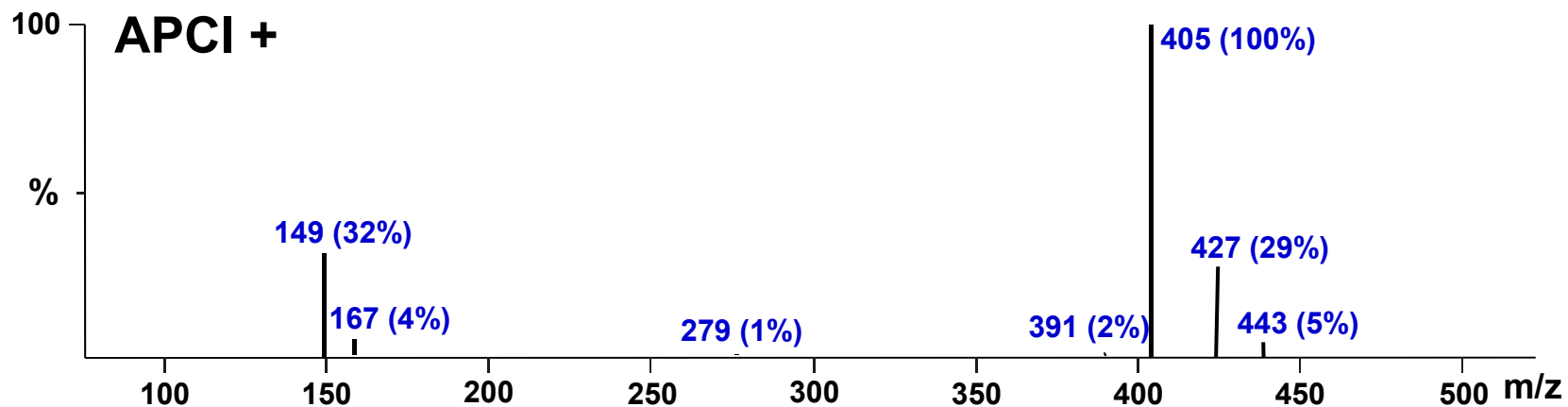
ESI +

Interpretace spektra?  
O jaký typ látky jde?



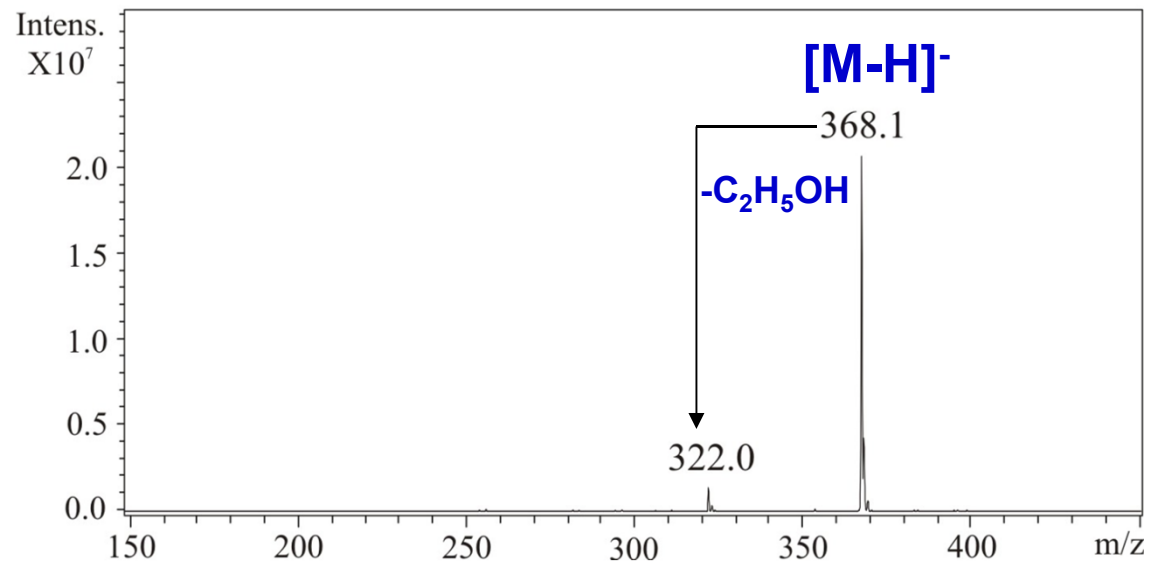
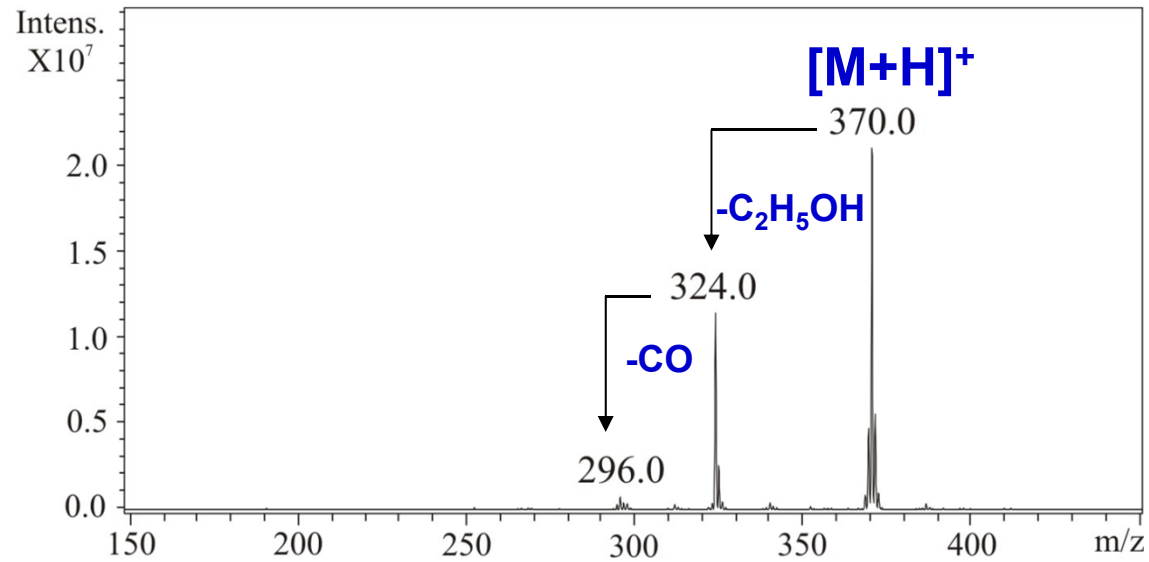


# No. 9 - určete MW, popište ionty



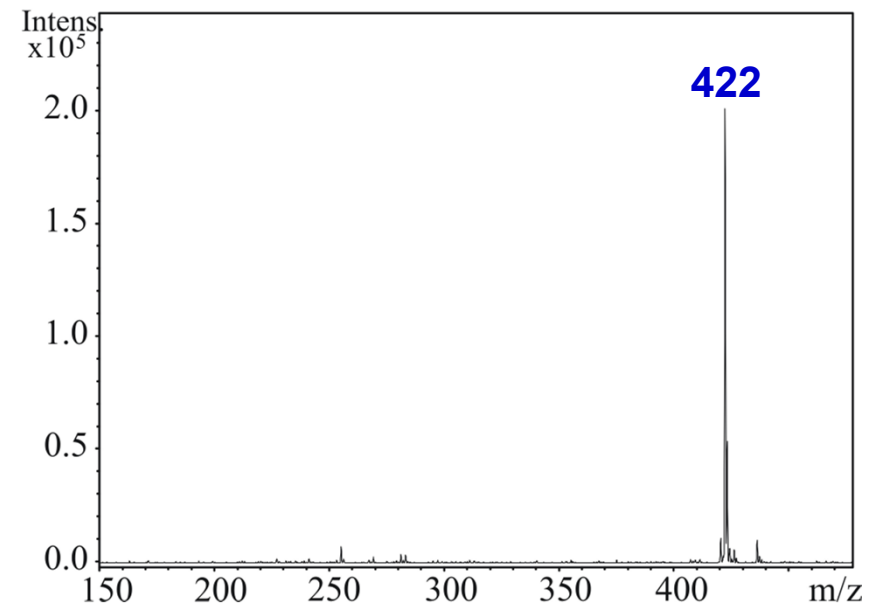
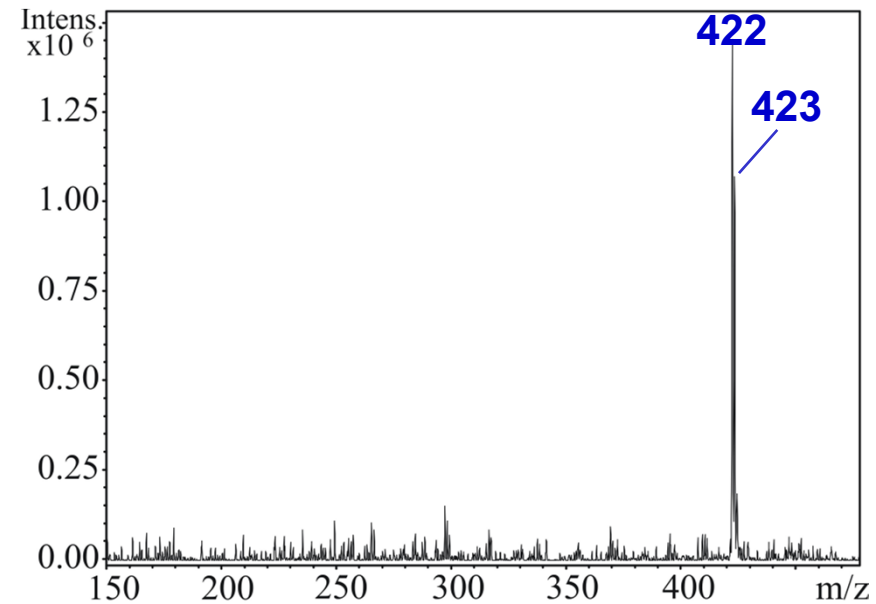
# No. 10

- 1/ Určete polaritu záznamů.
- 2/ Určete MW a popište ionty.

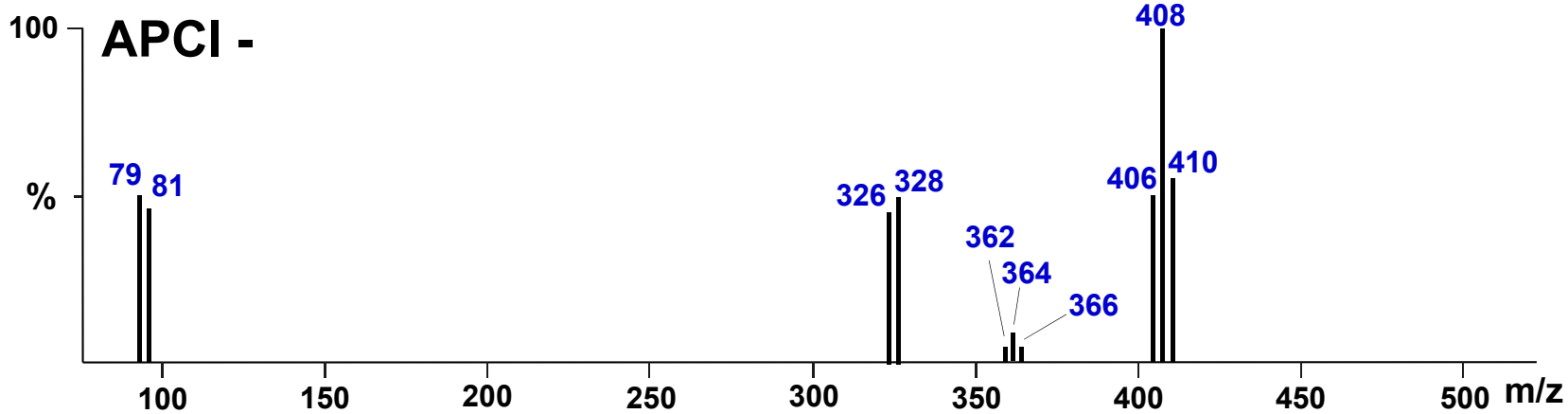
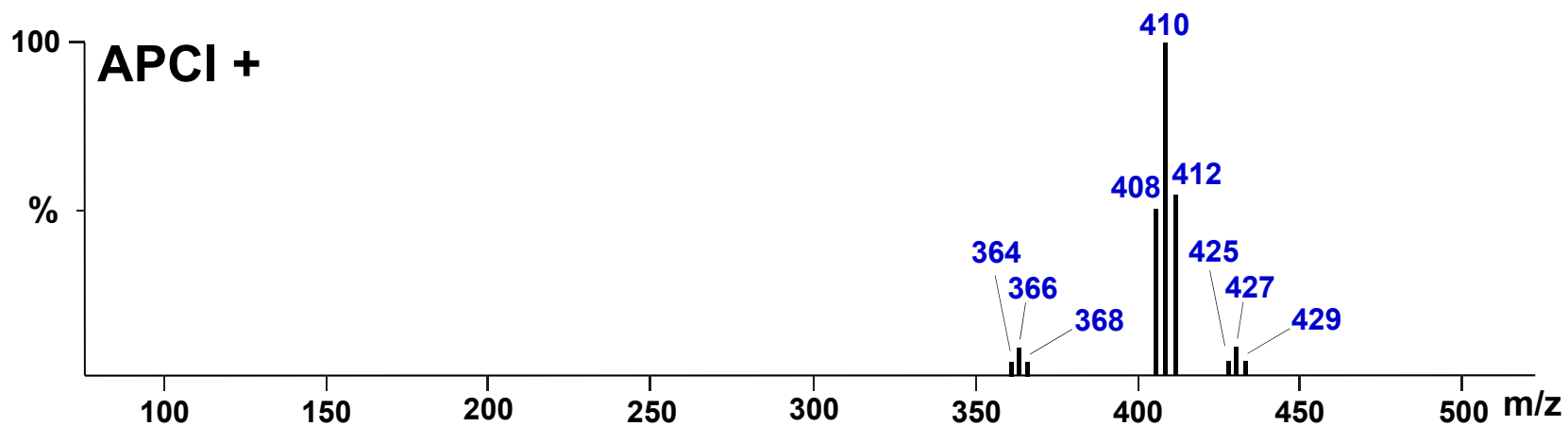


# No. 11 - Tvorba radikál iontů

Určete MW a popište ionty?  
Existuje alternativní řešení?

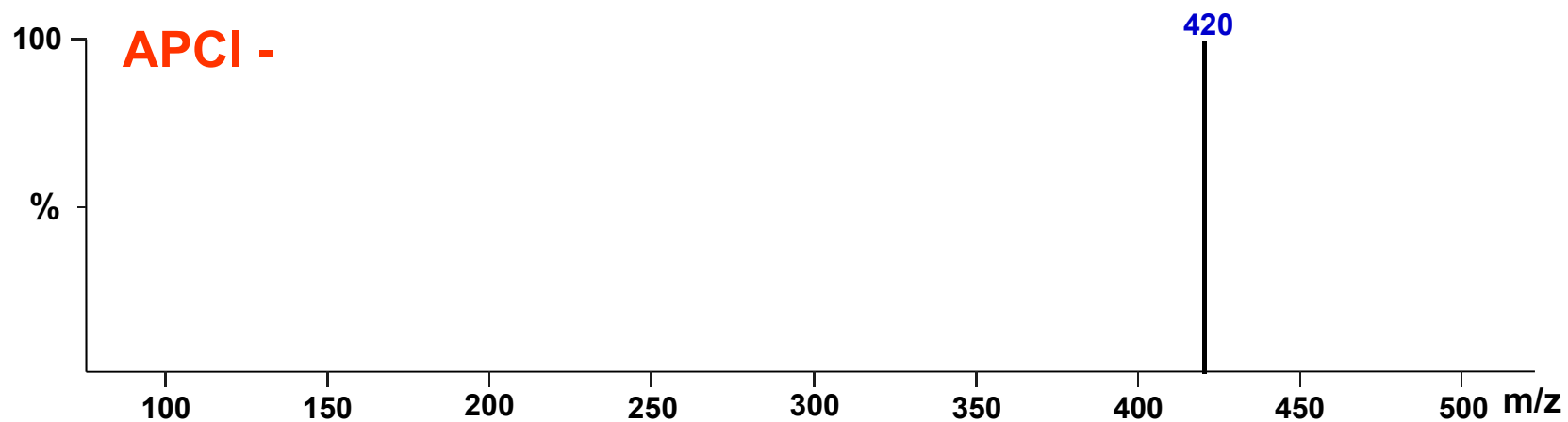
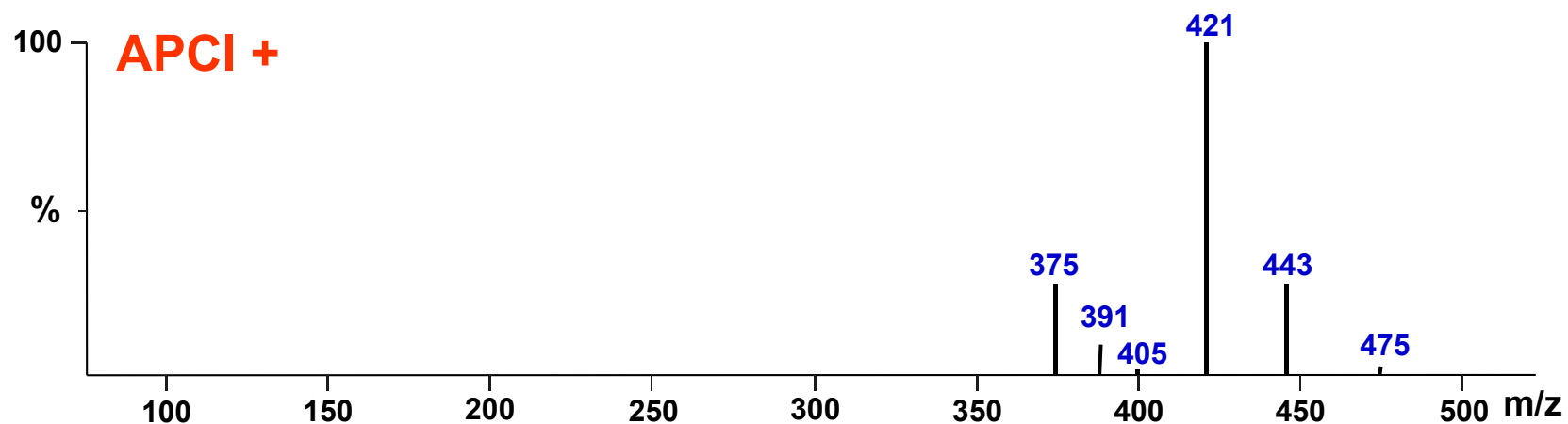


# No. 12 - určete $M_R$ a maximum informací



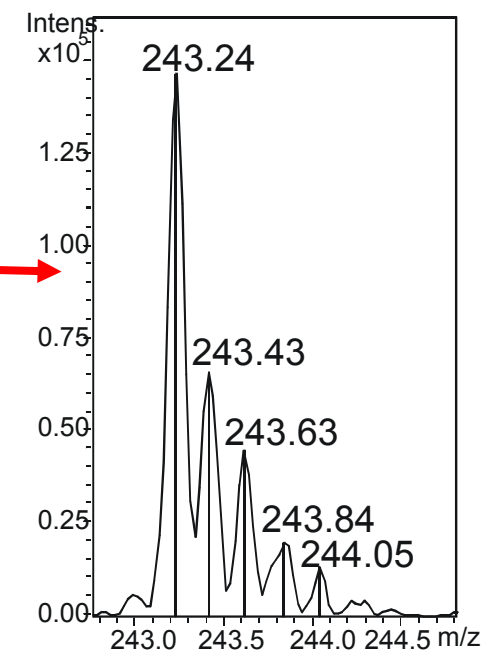
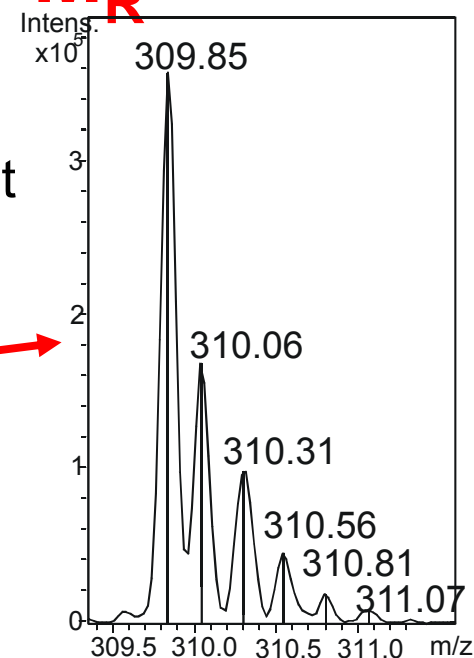
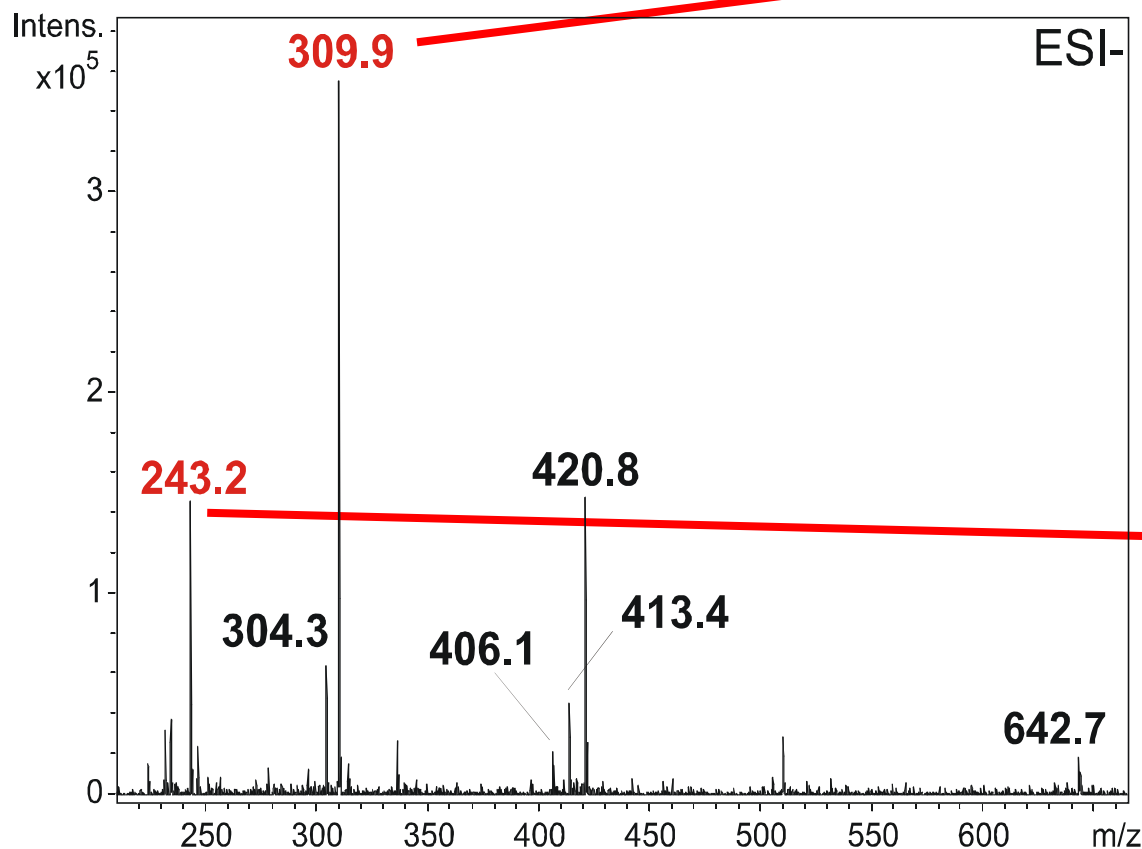
**Úkol:** nakreslete izotopickou obálku včetně intenzit pro dimerní ion  $[2M+H]^+$

# No. 13 - určete $M_R$ a strukturní informace



# No. 14 – popište ionty a určete $M_R$

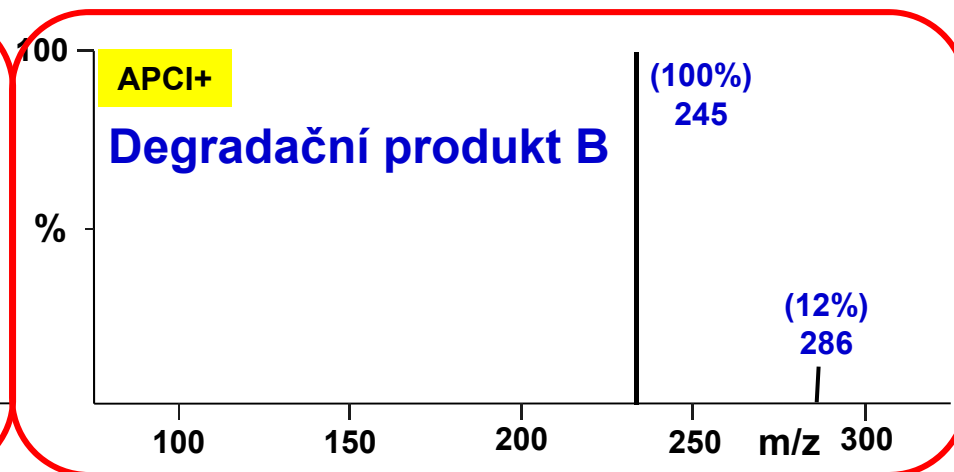
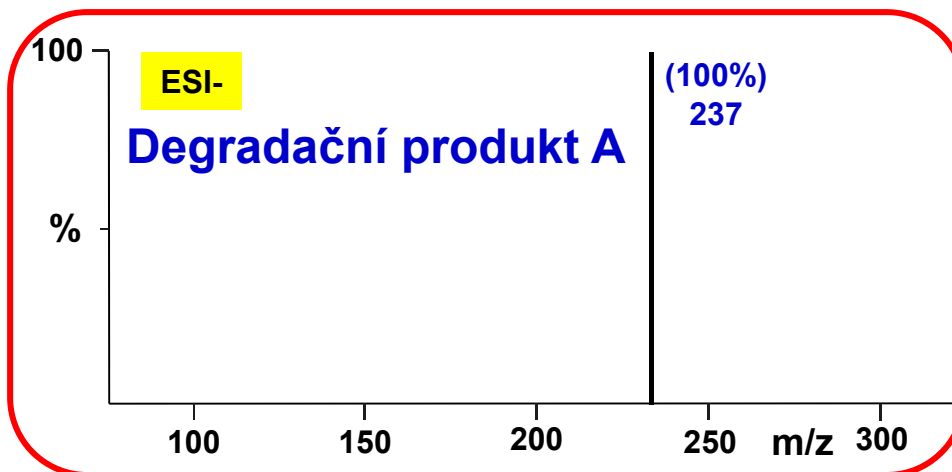
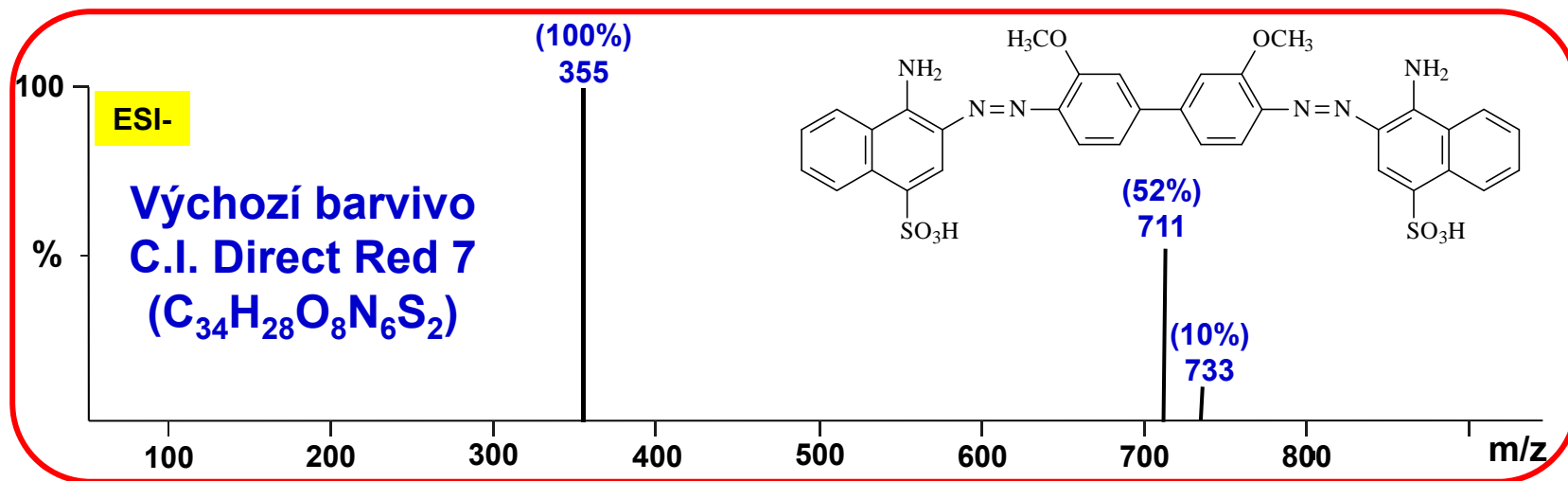
- série iontů  $[M-xH]x-$  a  $[M-(x+y)H+yNa]x-$
- maximální pozorovaný náboj  $x$  a/nebo maximální počet vyměnitelných protonů  $y =$  počet iontových skupin



# No. 15 – identifikujte degradační produkty

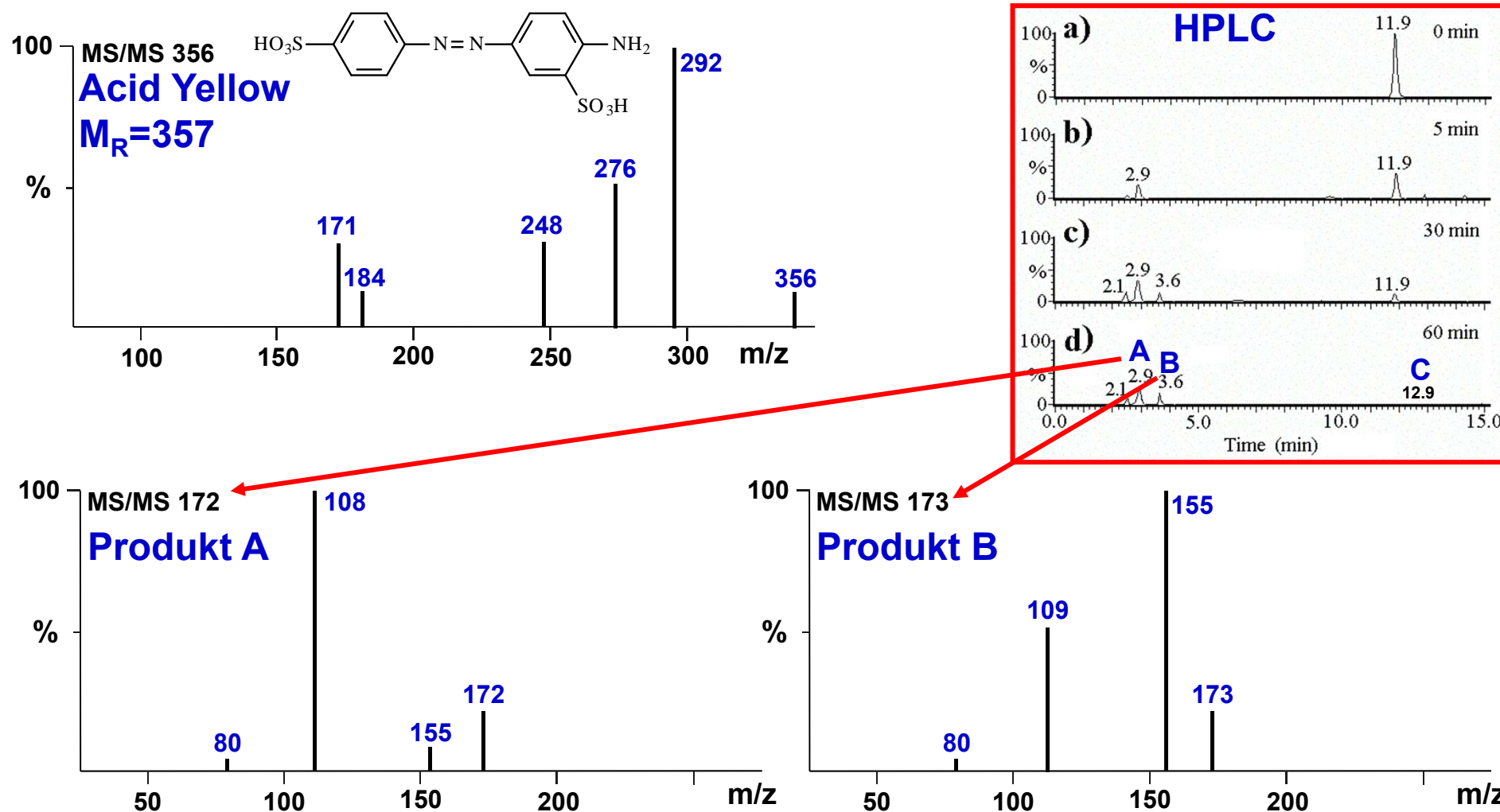
**Výchozí informace:** barvivo C.I. Direct Red 7 bylo elektrolyticky degradováno za redukčních podmínek, vzniklé produkty byly analyzovány pomocí HPLC/MS

**Úkol:** identifikujte produkty a navrhněte reakční mechanismus degradace



# No. 15 – identifikujte degradační produkty

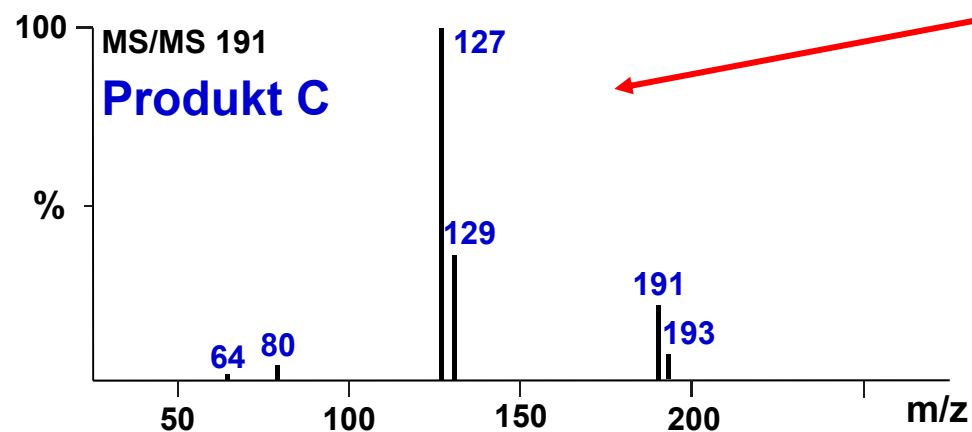
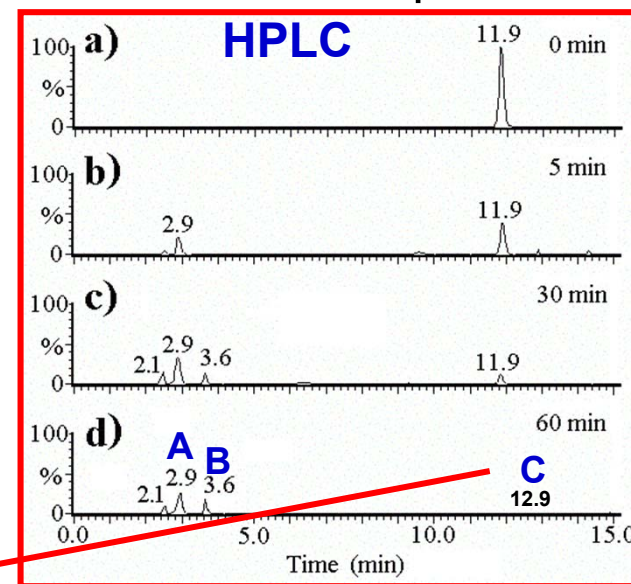
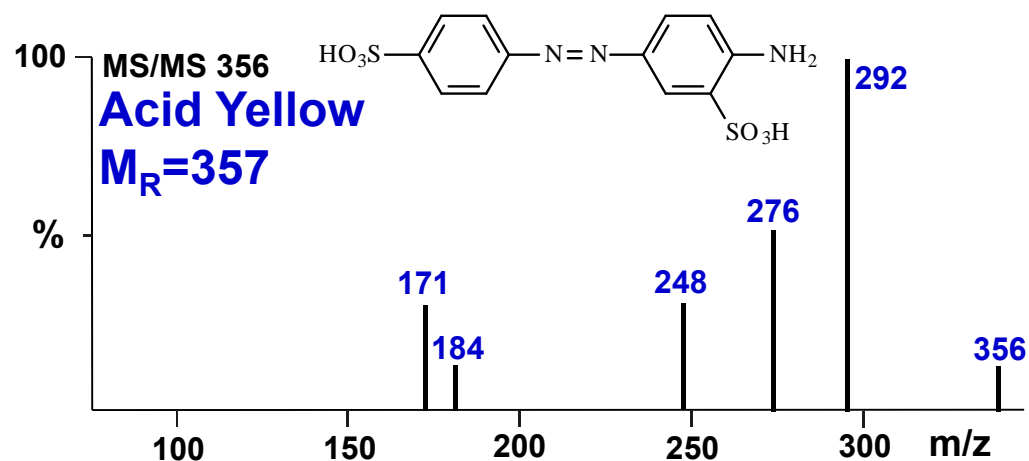
- **barvivo C.I. Acid Yellow 9** bylo elektrochemicky degradováno v NaCl kvůli čistění odpadních vod, HPLC/ESI-MS záporný mód, v základním skenu převládá ion, ze kterého bylo následně automaticky měřeno MS/MS spektrum





# No. 15 – identifikujte degradační produkty

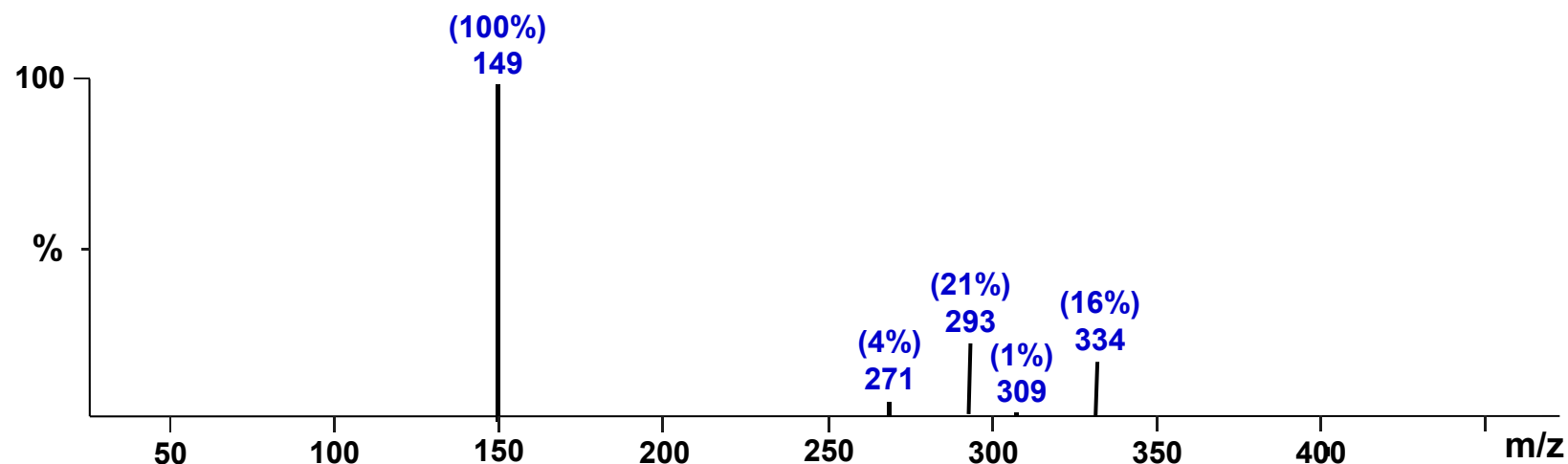
- **barvivo C.I. Acid Yellow 9** bylo elektrochemicky degradováno v NaCl kvůli čistění odpadních vod, HPLC/ESI-MS záporný mód, v základním skenu převládá ion, ze kterého bylo následně automaticky měřeno MS/MS spektrum



## No. 16 – identifikujte neznámou látku

**Výchozí informace:** stopové stanovení polární látky v odpadních vodách se nezdařilo kvůli složité matici a problémům s nízkou retencí této polární látky. Po derivatizaci s benzoylchloridem, extrakci do pentanu, následném odpaření do sucha, rozpuštěním v mobilní fázi a HPLC/ESI-MS analýze (C18 kolona, mobilní fáze 55% acetonitril - voda izokraticky) bylo dosaženo požadované citlivosti, selektivity i zlepšení retence.

**Úkoly:** 1/ pokuste se zinterpretovat pozorované ionty, určit  $M_R$  a navrhnout strukturu neznámé látky, 2/ zdůvodněte vysokou intenzitu iontu  $m/z$  149

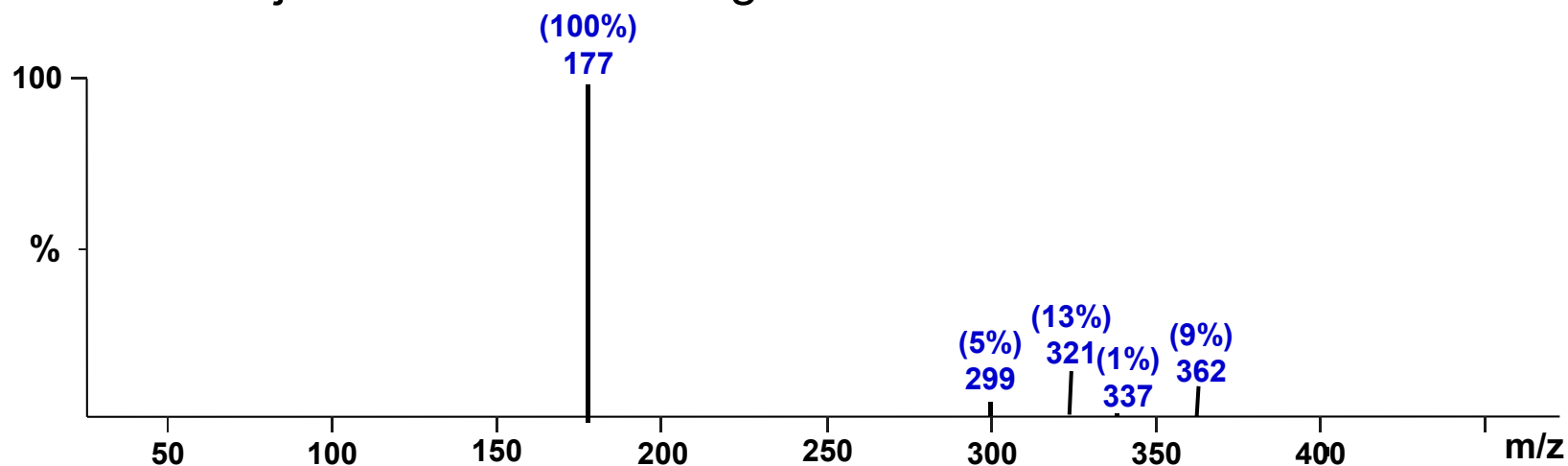


**Reference:** *Anal. Chem.* 71 (1999) 2288

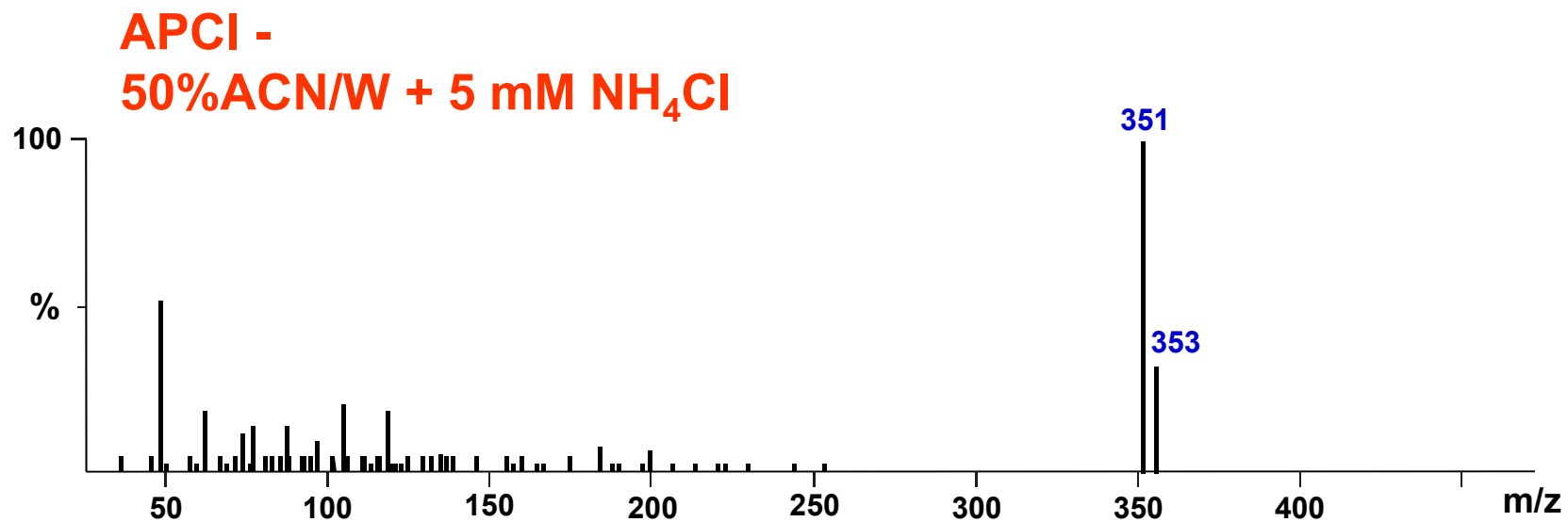
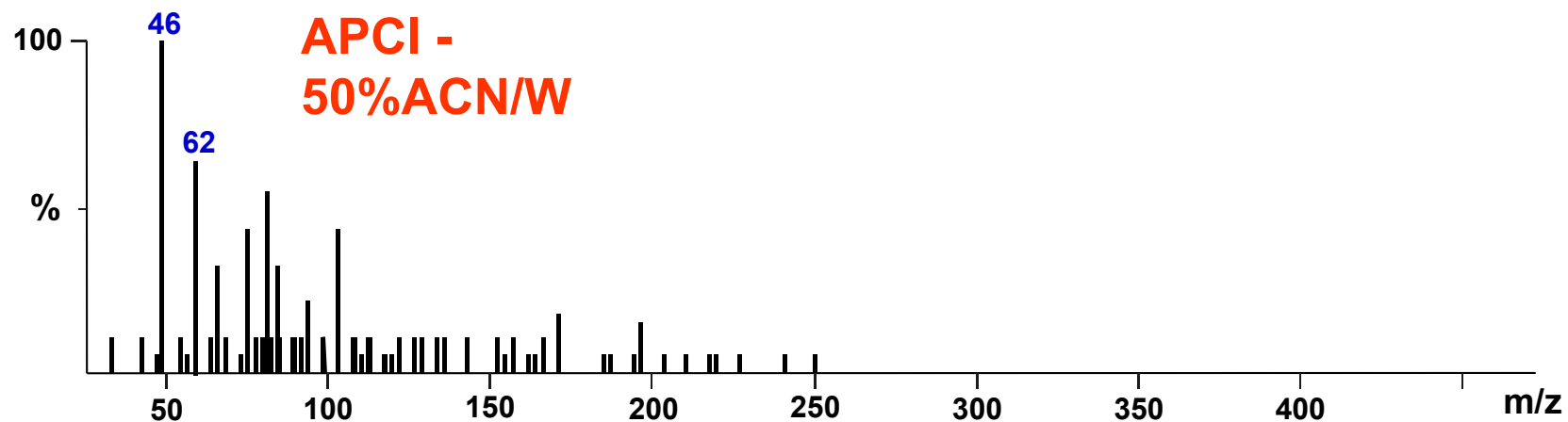
# No. 17 – identifikujte neznámou látku

**Výchozí informace:** platí všechny informace z předchozího příkladu, kromě hlavní složky byly ve vzorku odpadní vody detegovány další látky, spektrum jedné z nich je uvedeno zde

**Úkol:** identifikujte na základě analogie



# No. 18 - identifikujte!



# Typické zkouškové otázky

- význam izotopů v hmotnostní spektrometrii, vysvětlit na příkladech
- dusíkové pravidlo
- vysvětlit principy ionizačních technik: EI, CI, ESI, APCI, APPI, MALDI
- určení  $M_R$  proteinů pomocí ESI
- jaký je rozdíl mezi EI spektry a spektry měřenými měkkými ionizačními technikami, vysvětlit na modelovém příkladu
- vysvětlit fyzikální principy hmotnostních analyzátorů: magnetický analyzátor s dvojí fokusací iontů, Q, iontová past (sférická vs. lineární), TOF (včetně použití reflektoru a QqTOF uspořádání)
- co je to tandemová hmotnostní spektrometrie a  $MS^n$ ? k čemu se používá?
- vysvětlíte, jak byste správně provedli kvantitativní měření s pomocí HPLC/MS
- jakými způsoby lze provést kalibraci v hmotnostní spektrometrii? u jakým typů analyzátorů je kalibrace zvlášť důležitá?
- vysvětlit princip a praktické využití GC/MS a HPLC/MS
- jak budete volit ionizační techniku podle typu analytu? na čem bude volba záviset?
- základy interpretace hmotnostních spekter