

Gevorderde chromatografie en organische massaspectroscopie (C002555)

Wegens Covid19 kan mogelijk afgeweken worden van de onderwijs- en evaluatievormen. Dergelijke afwijkingen zullen via Ufora worden gecommuniceerd.

Cursusomvang (nominale waarden; effectieve waarden kunnen verschillen per opleiding)

Studiepunten 6.0 **Studietijd 150 u** **Contacturen** 55.0 u

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2020-2021

A (semester 2)	Engels	Gent	demonstratie	2.5 u
			hoorcollege	20.0 u
			practicum	22.5 u
			werkcollege: geleide oefeningen	10.0 u

Lesgevers in academiejaar 2020-2021

Lynen, Frederic	WE07	Verantwoordelijk lesgever
Desmet, Gert	VUB	Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2020-2021

	stptn	aanbodsessie
Educatieve Master of Science in de wetenschappen en technologie (afstudeerrichting chemie)	6	A
Master of Science in Chemistry	6	A

Onderwijsstalen

Engels

Trefwoorden

Scheidingstechnieken, massaspectrometrie

Situering

Theoretisch en praktisch aanleren van de meest moderne analysetechnieken ivm chromatografie, elektroforese en massaspectrometrie voor analyse van organische en biomoleculen

Inhoud

- 1 Fundamentals of State-of-the-Art Gas Chromatography
- 2 Fundamentals of State-of-the-Art Liquid Chromatography
- 3 High Throughput and High Resolution 1D Separation approaches
- 4 Kinetic plots in Liquid Chromatography
- 5 High Throughput and High Resolution 2D Separation approaches
- 6 Recent Developments in Sample Preparation for Gaseous, Liquid and Solid Samples
- 7 Fundamentals of Organic Mass Spectroscopy
- 8 Gas Chromatography - Mass Spectroscopy for small Molecules
- 9 Mass Spectroscopy - structural elucidation of small Molecules – principles I
- 10 Mass Spectroscopy - structural elucidation of small Molecules – principles II
- 11 Mass Spectroscopy - structural elucidation of small Molecules – implementation I
- 12 Mass Spectroscopy - structural elucidation of small Molecules – implementation II
- 13 Mass Spectroscopy - structural elucidation of small Molecules – implementation III
- 14 Gas Chromatography – Isotope ratio Mass Spectroscopy
- 15 Liquid Chromatography – Mass Spectroscopy for Small Molecules
- 16 Liquid Chromatography – Mass Spectroscopy for Biomolecules

- 17 Selection of a Chromatographic Technique for a Given Application
- 18 Pressure versus Electroosmotic Driven Chromatographic Techniques
- 19 Stationary phase as an adaptable tool for selectivity tuning in chromatography
- 20 non-linear versus linear chromatography – principles of preparative chromatography
- 21 Advanced chromatographic method validation techniques for improved quantitative analysis

Tutorials

- 1 Constructing Kinetic Plots
- 2 Interpretation of MS Data. Part 1. Small volatile molecules, ionization, molecular ion, link elemental composition, nitrogen rule, isotopic clusters
- 3 Interpretation of MS Data. Part 2: factors influencing ion abundance, fragmentation types, sigma electron ionization, radical site initiation, charge site initiation, McLafferty rearrangement
- 4 Interpretation of MS Data. Part 3: alkanes, polyaromatic hydrocarbons, alcohols, esters, aldehydes and ketones, amines, allocation of structures to spectra, interpretation of unknown spectra
- 5 Interpretation of MS Data. Part 4: (high resolution) MS analysis of non-volatile, LC-compatible solutes.

Practicals

qualitative and quantitative analysis of mixtures of organic solutes. The course participant is provided with controlled mixtures of samples for which he or she is challenged to practically select the optimal analysis methods, develop the optimal separation and to identify and quantify the solutes. Strong emphasis is set on the development of student self-reliance.

Begincompetenties

Fundamentele aspecten van chromatografie en massaspectrometrie

Eindcompetenties

- 1 In staat zijn om geschikte monstervoorbereiding- scheidings- en detectietechnieken te selecteren om kwalitatieve of kwantitatieve organische analyse problemen op te kunnen lossen.
- 2 In staat zijn om monstervoorbereiding- scheidings- en detectietechnieken praktisch en theoretisch te kunnen implementeren om kwalitatieve of kwantitatieve organische analyse problemen op te kunnen lossen.
- 3 De student is in staat om electron ionisatie (EI) massaspectra van moleculen met de belangrijkste functionele groepen te interpreteren.
- 4 De student is in staat om de geschikte scheidings en detectie techniek te selecteren om kwalitatieve en kwantitatieve analyse van a priori onbekende monsters toe te laten.
- 5 De student is in staat om zonder begeleiding kwantitatieve en kwalitatieve HPLC en GC-MS analyses uit te voeren en te interpreteren.
- 6 De student is in staat om oplossingen te bedenken om bemonstering, scheidings- en detectie problemen zowel in theorie als in praktijk op te lossen.
- 7 De student is in staat om electrospray- en (atmosferische druk) chemische ionisatie massaspectra te interpreteren.

Creditcontractvoorwaarde

Toelating tot dit opleidingsonderdeel via creditcontract is mogelijk mits gunstige beoordeling van de competenties

Examencontractvoorwaarde

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

Didactische werkvormen

Demonstratie, hoorcollege, practicum, werkcollege: geleide oefeningen

Toelichtingen bij de didactische werkvormen

Hoorcolleges omtrent de meest recente ontwikkelingen via powerpoint presentaties
 Practica op chromatografische apparatuur. Omwille van COVID19 kunnen gewijzigde werkvormen uitgerold worden indien dit noodzakelijk blijkt.

Leermateriaal

Powerpoint presentaties (Ufora)

Recente literatuur

Volgende handboeken zijn relevant m.b.t. het luik massaspectrometrie. Ze dienen niet aangekocht te worden. Studenten kunnen steeds een kopie ter beschikking krijgen op vraag.

Spectroscopic methods in Organic Chemistry, DH Williams and I. Fleming, McGraw-Hill, ISBN 0-07-709147-7

Organic Structure Analysis, P Crews, J. Rodriguez, M. Jaspars, Oxford university press, ISBN 0-19-510102-2

Mass spectrometry, JH Gross, Springer, ISBN 978-3-319-54398-7

Referenties

Analytical Chemistry

LC.GC Europe

Journal of Chromatography A

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

Individuele begeleiding door lesgever en assistenten op afspraak.

Vragen stellen gedurende practica en werkcolleges

Evaluatiemomenten

periodegebonden en niet-periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Schriftelijk examen

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Schriftelijk examen

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Participatie, vaardigheidstest, verslag

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Examen in de tweede examenperiode is mogelijk

Toelichtingen bij de evaluatievormen

Schriftelijk examen

Eindscoreberekening

Periodegebonden evaluatie (70%) + Niet-periodegebonden evaluatie (30%). Een student die ongegrond afwezig is of die niet deelneemt aan (een deel van) de nietperiodegebonden evaluatie, is niet geslaagd voor het opleidingsonderdeel. De punten voor de niet-periodegebonden evaluatie blijven behouden voor de tweede examenperiode, die enkel een periodegebonden examen omvat.