

课程名称：现代色谱质谱分析及实验

一、课程编码：1900033

课内学时：48 学分：3

二、适用学科专业：化学、化工、环境、材料及生命科学类各相关专业

三、先修课程：仪器分析、分析化学、物理化学等。

四、教学目标：

通过本课程的学习，使学生全面学习质谱的基础理论，掌握基本的识谱和解谱技能；系统了解质谱及串联质谱仪器的基本构造及研究方法；了解质谱分析技术的最新进展；通过上机实践，学会质谱以及色谱-质谱仪器的使用并掌握色谱-质谱技术对复杂混合物分离、定性及定量方法。

五、教学方式：

课堂讲授、文献综述及教学实验相结合。

六、主要内容及学时分配：

(一) 理论课主要内容

- | | | |
|---|--------------------------------------------------------------------------------------|------|
| 1 | 绪论 | 2 学时 |
| | 1.1 有机质谱的发展历史 | |
| | 1.2 我国有机质谱概况 | |
| | 1.3 有机质谱的进展 | |
| 2 | 质谱仪器介绍 | 4 学时 |
| | 2.1 双聚焦磁质谱仪；四极杆质谱仪；离子阱质谱仪；傅立叶变换离子回旋共振质谱仪；飞行时间质谱仪 | |
| | 2.2 串联质谱 | |
| 3 | 离子化方法 | 4 学时 |
| | 3.1 电子轰击电离；化学电离；快原子轰击电离 | |
| | 3.2 电喷雾电离；大气压化学电离 | |
| | 3.3 基质辅助激光解析电离 | |
| 4 | 稳定同位素的分类及其特征 | 4 学时 |
| | 4.1 “A”元素，“A+1”元素和“A+2”元素 | |
| | 4.2 具有稳定同位素的金属元素 | |
| | 4.3 同位素的天然丰度及元素组成 | |
| | 4.4 选择最大丰度同位素计算分子量 | |
| 5 | 质谱法确定化合物的分子式 | 4 学时 |
| | 5.1 基本概念（分子离子和准分子离子；奇电子离子和偶电子离子；氮规则；中性碎片丢失；环加双键数） | |
| | 5.2 分子离子峰的判断 | |
| | 5.3 高分辨法确定分子式 | |
| 6 | 离子裂解的基本机理 | 4 学时 |
| | 6.1 电荷及游离基定域概念 | |
| | 6.2 σ 断裂， α 断裂， i 断裂，逆 Diels-Alder 反应，McLafferty 重排，游离基诱导及电荷诱导的重排反应等 | |
| | 6.3 特征碎片离子 | |

- | | | |
|-----|----------------------------------------------------|------|
| 6.4 | 影响离子丰度的因素 | |
| 7 | 现代质谱在生命科学领域的应用 | 6 学时 |
| | 7.1 生物大分子的分子量测定 | |
| | 7.2 多肽、蛋白质、DNA 片段的序列分析 | |
| | 7.3 应用实例分析 | |
| 8 | 现代质谱在超分子领域的应用 | 6 学时 |
| | 8.1 超分子的概念及特点 | |
| | 8.2 检测超分子的实验技术 | |
| | 8.3 应用实例分析 | |
| 9 | 现代质谱在无机化学及其他化学领域的应用 | 6 学时 |
| | 9.1 无机配合物的电喷雾质谱 | |
| | 9.2 应用实例分析 | |
| 10 | 色谱-质谱联用技术 | 6 学时 |
| | 10.1 气相色谱-质谱联用系统的构成及主要性能指标 | |
| | 10.2 气相色谱-质谱联用应用 | |
| | 10.3 液相色谱-质谱仪器与技术 | |
| | 10.4 液相色谱-质谱联用应用 | |
| (二) | 实验课主要内容: | 8 学时 |
| | 实验一 ESI-Q-TOF 串联质谱仪器操作训练 | |
| | 实验二 碰撞诱导解离实验 (Collision-induced Dissociation, CID) | |
| | 实验三 质谱法确定未知物结构(一): 高分辨法确定分子式 | |
| | 实验四 质谱法确定未知物结构(二): MS/MS 法确定离子结构 | |
| | 实验五 液相色谱-质谱联用技术(一): 仪器的调谐、数据采集和分析 | |
| | 实验六 液相色谱-质谱联用技术(二): 化学合成药物的 LC/MS 分析 | |
| | 实验七 气相色谱-质谱联用技术(一): 仪器的调谐、数据采集和分析 | |
| | 实验八 气相色谱-质谱联用技术(二): 食用油成分的 GC/MS 分析 | |

七、考核与成绩评定

成绩以百分制衡量。

成绩评定依据: 质谱新技术文献综述占30%, 实验报告成绩占30%, 期末笔试成绩占40%。

八、参考书及学生必读参考资料:

教材:

- 1、何美玉编著,《现代有机与生物质谱》,北京大学出版社:2001
- 2、盛龙生,苏焕华,郭丹滨编著,《色谱质谱联用技术》,化学工业出版社:2005

必读参考资料:

- 1、陈耀祖,涂亚平著,《有机质谱原理及应用》,科学出版社:2001
- 2、王光辉,熊少祥编著,《有机质谱解析》,化学工业出版社,2005
- 3、John L. Holmes, Christiane Aubry, Paul M. Mayer. 《Assigning Structures to Ions in Mass Spectrometry》, CRC Press, Taylor & Francis Group: 2007
- 4、盛龙生,汤坚编著,《液相色谱质谱联用技术在食品和药品分析中的应用》,化学工业出版社:2008

九、大纲撰写人: 曹洁