

SPRAWOZDANIE z analizy widma masowego

ZALECENIA

WSKAZÓWKI:

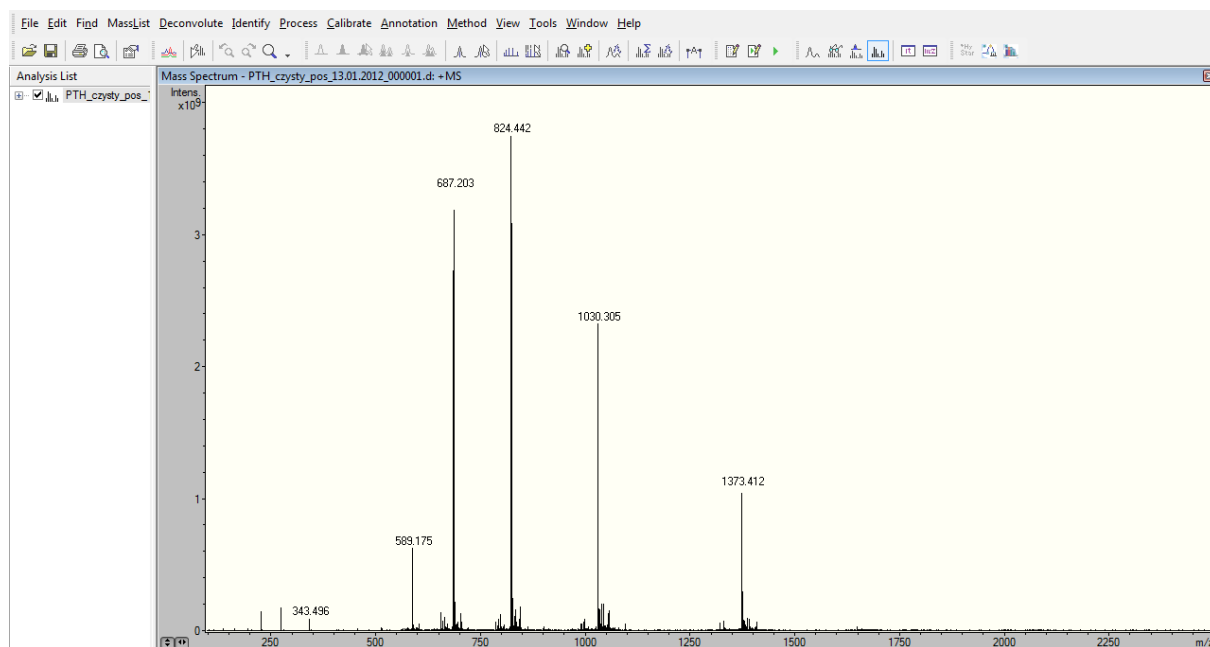
- ✓ Proszę bardzo dokładnie zaznaczać co jest obserwacją, czyli informacją uzyskaną bezpośrednio z widma masowego, a co jest wnioskiem płynącym z uzyskania tej informacji.
- ✓ W przypadku podawania wartości m/z proszę stosować dokładność wartości 3 miejsc po przecinku.
- ✓ Proszę umieszczać rysunki widm, z których wyciągnięto dany wniosek wraz z pełnym opisem tego, co się na nim znajduje.
- ✓ W przypadku stosowania algorytmów obliczeniowych proszę podać parametry, według których zostały one wykonane.
- ✓ Proszę zwrócić uwagę na stosowany język, jego poprawność również będzie oceniana. Nie powinno się używać sformułowań potocznych: nie „na rysunku” a „na widmie masowym”, nie „sygnał dla masy” a „sygnał dla wartości m/z ”, nie „naładowana cząsteczka” a „cząsteczka zjonizowana”, nie „niskie/wysokie sygnały” a „sygnały o niskich/wysokich intensywnościach”, itp.

SPRAWOZDANIE:

- ✓ Sprawozdanie należy przygotować w formie papierowej. Musi zawierać pełną interpretację otrzymanego widma masowego z opisem obserwacji i wniosków.
- ✓ Powinno zostać wykonane na komputerze i zawierać widma masowe wygenerowane w programie Data Analysis, w celu potwierdzenia wniosków.
- ✓ Powinno zawierać kompletny opis aparatu i techniki wykonania pomiaru, wraz ze wszystkimi parametrami.
- ✓ Powinno zawierać komplet obliczeń, jeśli takie były wykonane (np. wyznaczanie średniej masy cząsteczkowej).
- ✓ Wymagania edytorskie:
 - wydrukowane **dwustronnie**, kolor nie jest konieczny
 - czcionka **nie większa niż 12 pt**
 - tekst bezwzględnie **wyjustowany**

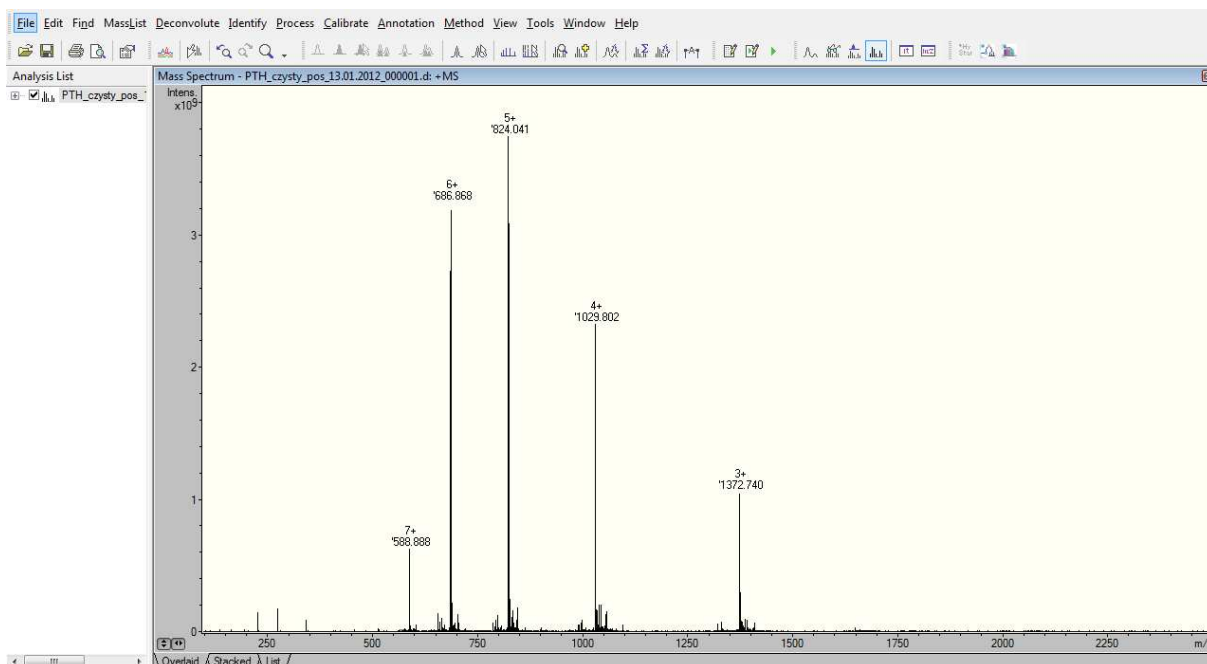
Nie zastosowanie się do powyższych zaleceń spowoduje obniżenie oceny, bądź konieczność poprawy sprawozdania.

PRZYKŁADY POPRAWNEGO ZAPISU OBSERWACJI I WNIOSKÓW:



OBSERWACJA: Na widmie masowym ESI-MS znajduje się 5 sygnałów o dużych intensywnościach o wartościach m/z 589.175, 687.203, 824.442, 1030.305 oraz 1373.412. Dodatkowo znajdują się sygnały o niewielkich intensywnościach, zwykle w otoczeniu sygnałów dominujących na widmie.

WNIOSKI: Widmo masowe ESI-MS przedstawia albo mieszaninę 5 różnych związków, albo jeden związek wielokrotnie zjonizowany. Charakterystyczny rozkład pików na widmie sugeruje, iż w tym przypadku może to być widmo peptydu. Niewielka ilość dodatkowych sygnałów wskazuje, iż próbka jest stosunkowo czysta, nie obserwujemy wielu zanieczyszczeń. Obecność dodatkowych pików w otoczeniu głównych sygnałów może sugerować tworzenie się adduktów z jonami metali.



OBSERWACJA: Zastosowanie algorytmu SNAP pozwoliło na przypisanie odpowiednich ładunków na widmie – 588.9 (7+), 686.9 (6+), 824.0 (5+), 1029.8 (4+), 1372.7 (3+).

WNIOSEK: Widmo ESI-MS przedstawia widmo cząsteczki, która może jonizować się wielokrotnie. Obserwowane jony od 3+ do 7+ świadczą, że w cząsteczce istnieje możliwość przyłączenia od 3 do 7 protonów. Rozkład pików na widmie jest charakterystyczny i odpowiada cząsteczce peptydu, która również może ulegać wielokrotnej jonizacji w przypadku obecności odpowiednich reszt aminokwasowych w łańcuchu. Na podstawie uzyskanych wartości m/z oraz przypisanych ładunków możliwe jest określenie średniej masy cząsteczkowej badanego związku.

[Obliczenia lub rezultat zastosowania metody obliczeniowej opartej na dekonwolucji (Data Analysis)]

Obliczona średnia masa cząsteczkowa wynosi: 4117 Da

WNIOSEK: Otrzymana próbka zawierała związek o dużej masie cząsteczkowej, ponad 4000 Da. Ten fakt oraz obecność charakterystycznej obwiedni sygnałów na widmie sugeruje, iż badaną substancją był polipeptyd o ok. 40 resztach aminokwasowych w łańcuchu.