

**Förutsättningslös kemisk analys med högupplösande
masspektrometri, 6.0 hp**

Nontarget Chemical Analysis using High Resolution Mass
Spectrometry, 6.0 credits

Forskarutbildningskurs

6FIFMB5

Institutionen för fysik, kemi och biologi

Gäller från: Första halvår 2026

Fastställd av

Fastställandedatum

Diarienummer

Behörighetskrav

Grundläggande behörighet till kurser på forskarutbildningsnivå har den som har

- avlagt en examen på avancerad nivå,
- fullgjort kursfordringar om minst 240 högskolepoäng (hp), varav minst 60 hp på avancerad nivå, eller
- på något annat sätt förvärvat motsvarande kunskaper.

För denna kurs krävs dessutom grundläggande kunskaper inom analytisk kemi samt masspektrometri på avancerad nivå.

Lärandemål

Efter avslutad kurs förväntas* *studenten kunna:

- redogöra för de fysikaliska och kemiska principerna bakom högupplösande masspektrometri,
- förklara skillnaden mellan riktad och förutsättningslös analys samt när respektive strategi är lämplig,
- beskriva centrala steg i HRMS-baserade arbetsflöden: provberedning, kromatografisk separation, jonisering, massanalys, dataförbehandling och statistiska strategier,
- förklara principer för formuläprediktion, fragmenteringsmekanismer, bibliotekssökning och in silico-annotering,
- redogöra för etablerade standarder för annoteringsnivåer (t.ex. Schymanski-klassificering).
- planera och genomföra ett HRMS-baserat experimentellt upplägg för förutsättningslös analys av komplexa kemiska prover,
- självständigt utföra grundläggande och avancerad dataförbehandling: brusreducering, peak-finding, alignment, normalisering och batch-korrektion,
- använda relevanta mjukvaror och bioinformatikverktyg (t.ex. MZmine, SIRIUS/CSI:FingerID, MetFrag) för annotering och hypotesgenerering,
- tolka MS- och MS/MS-spektra för att motivera möjliga strukturer och kemiska identiteter,
- kritiskt analysera resultat, osäkerheter och begränsningar i förutsättningslösa arbetsflöden,
- utforma vetenskapligt hållbara argument kring identifikationsgrad och validering av föreslagna strukturer.
- kritiskt och självständigt värdera kvalitet, reproducerbarhet och tillförlitlighet hos data från förutsättningslös HRMS-analys,
- bedöma metodens möjligheter och begränsningar i relation till specifika forskningsfrågor, särskilt inom miljöanalys, exposomik, metabolomik och kemiska föroreningar,
- reflektera över hur algoritmer, databaser och maskininlärningsmodeller påverkar objektivitet och bias i annotering av okända ämnen,
- hantera forskningsetiska aspekter såsom datahantering, spårbarhet, öppna data och reproducerbarhet i masspektrometribaserad forskning,
- visa förmåga att kommunicera och försvara sina resultat i skriftlig och muntlig vetenskaplig form.

Kursinnehåll

Kursen ger en koncentrerad introduktion till förutsättningslös kemisk analys med högupplösande masspektrometri (HRMS). Studenten får en översikt över centrala instrumentprinciper för HRMS, jonmobilitetsmasspektrometri samt betydelsen av joniseringsmetoder för analys av komplexa prover. Arbetsflödet för förutsättningslös analys går igenom från experimentell design till insamling av MS- och MS/MS-data, med fokus på dataförbehandling såsom peak-detektion, alignment, normalisering och hantering av batch-effekter.

Kursen behandlar även strategier för annotering och strukturell elucidering, inklusive formulaprediktion, fragmenteringsanalys, spektralbibliotek och in silico-metoder. Studenten introduceras till relevanta databaser och verktyg som GNPS, MassBank och SIRIUS/CSI:FingerID. Betydelsen av etablerade identifikationsnivåer, särskilt Schymanski-ramverket, diskuteras tillsammans med aspekter kring kvalitet, reproducerbarhet och transparens. Genom praktiska datorövningar och ett projektmoment får studenten tillämpa ett komplett HRMS-baserat arbetsflöde på realistiska datamängder.

Undervisnings- och arbetsformer

Undervisnings- och arbetsformer i denna kurs är föreläsningar, workshops, datorlaborationer, seminarier, litteraturstudier samt projektuppgift.

Examination

Individuell projektuppgift inklusive dataanalys som redovisas i muntlig presentation. Aktivt deltagande i seminarier och övningar.

Betygsskala

Tvågradig skala

Kurslitteratur

Tillhandahållas av kursansvarig.

Övrig information

Planering och genomförande av kursen skall utgå från kursplanens formuleringar. Kursvärdering samt analys och förslag som rör generell utveckling och förbättring av kursen återkopplas till Forsknings- och forskarutbildningsnämnden av kursansvarig lärare.