

DIPARTIMENTO DI CHIMICA



**SAPIENZA**  
UNIVERSITÀ DI ROMA

## IL DIRETTORE DI DIPARTIMENTO

VISTO lo Statuto di Ateneo emanato con DR n. 3689 del 29.10.2012, prot. n. 0068595 e ss.mm.ii;

VISTO il Regolamento del Dipartimento di Chimica emanato con D.R. n. 481 Prot. 3777 del 27.11.2019;

TENUTO CONTO che il laboratorio di spettrometria di massa ad alta risoluzione (HRMSLab) è stato istituito grazie al finanziamento ottenuto per un Progetto Grandi Attrezzature dell'Università La Sapienza per acquisire uno strumento di nuova generazione una piattaforma SCIEX ZenoTOF 7600 (Anno: 2022 - prot. GA122181AEFBE248);

TENUTO CONTO che il Consiglio di Amministrazione ha assegnato la gestione amministrativa del Progetto al Dipartimento di Chimica e che quest'ultimo ha messo a disposizione la Stanza 064 Edificio CU014 dove è stato installato lo strumento;

CONSIDERATE le esigenze di regolamentare il Laboratorio di spettrometria di massa ad alta risoluzione "HRMSLab" per il personale interno ed esterno al Dipartimento;

VISTA la delibera del Consiglio di Dipartimento del 07.04.2025 Punto 4.2 con cui è stato approvato l'adozione del Regolamento del Laboratorio di spettrometria di massa ad alta risoluzione "HRMSLab"

## DISPONE

l'adozione del seguente Regolamento Laboratorio di spettrometria di massa ad alta risoluzione "HRMSLab".

Il presente Regolamento dispiega i suoi effetti con decorrenza dalla data di registrazione e sarà pubblicato sulla pagina web del Dipartimento.

Roma, il 08.04.2025

Il Direttore del Dipartimento  
Prof. Osvaldo Lanzalunga  
Firma autografa sostituita a mezzo  
stampa ai sensi dell'art. 3, comma 2, del d.lgs. 39/93

## **SCIEX ZenoTOF 7600: an Innovative High Resolution Mass Spectrometry Based on Dual Fragmentation Process** (Grandi Attrezzature Scientifiche di Ateneo, Anno: 2022 - prot. GA122181AEFBE248)

Un potente balzo in avanti nella spettrometria di massa a tempo di volo quadrupolare (QTOF-MS) è rappresentato dallo strumento SCIEX ZenoTOF 7600 che combina caratteristiche prestazionali all'avanguardia, finora non fornite da una singola configurazione MS (Orbitrap, triplo quadrupolo, FTICR, ecc.). Questo sistema di massa accurato ad alta risoluzione offre una sensibilità e una capacità diagnostica senza pari grazie a un cambiamento radicale nelle tecnologie di intrappolamento e frammentazione degli ioni. La prima innovazione chiave è una trappola ionica (Zeno trap) che, pulsando rapidamente gli ioni accumulati nell'analizzatore TOF, può ridurre in modo impressionante il duty cycle (fino al 90%), migliorare la sensibilità strumentale e aumentare il range dinamico lineare raggiungendo gli standard di un triplo quadrupolo (il gold standard per l'analisi quantitativa). La seconda innovazione rivoluzionaria è il sistema di doppia frammentazione, che si basa su un dispositivo convenzionale di dissociazione indotta da collisione (CID) e su una cella di dissociazione di attivazione elettronica alternativa (EAD). Nel complesso, queste specificità consentono di eseguire analisi in un range di massa ampissimo (20-40000 Da), di effettuare analisi quantitative affidabili, di caratterizzare molecole ad alto peso molecolare, di distinguere tra isomeri posizionali di piccole molecole e lipidi, e di identificare e quantificare da centinaia a migliaia di metaboliti in un'unica analisi.

### **Regolamento del Laboratorio di spettrometria di massa ad alta risoluzione "HRMSLab"**

(approvato nel CdD Chimica il 7/4/2025)

Il laboratorio di spettrometria di massa ad alta risoluzione (HRMSLab) nasce grazie al finanziamento ottenuto per un Progetto Grandi Attrezzature dell'Università La Sapienza per acquisire uno strumento di nuova generazione una piattaforma SCIEX ZenoTOF 7600 (Anno: 2022 - prot. GA122181AEFBE248). Lo scopo è quello di offrire alla comunità scientifica della nostra università la possibilità di accedere ad una strumentazione di avanguardia, che costituisce una nuova frontiera per la delucidazione della struttura dei sistemi chimici. La strumentazione potrà essere utilizzata anche da altri enti scientifici nazionali o internazionali e da industrie.

Il CdA ha assegnato la gestione amministrativa del progetto al Dipartimento di Chimica. Il Dipartimento di Chimica ha messo a disposizione la Stanza 064 edificio CU014 dove è stato installato lo strumento. La piattaforma strumentale verrà gestita da un Comitato di Gestione (CG) e da un Comitato Tecnico Scientifico (CTS).

Il Comitato di Gestione è costituito dai tre proponenti/coproponenti del progetto (Proff. Osvaldo Lanzalunga, Alessandra Gentili, Maria Elisa Crestoni), da tre membri partecipanti al progetto, dal tecnico responsabile Dott.ssa Lorella Gentile e dal responsabile amministrativo (RAD) del Dipartimento di Chimica. I tre membri del CG partecipanti al progetto rimangono in carica per tre anni.

#### **Compiti del CG**

Il CG stabilirà le linee per la gestione della macchina, in modo da garantire l'accesso a tutti gli utenti. Il CG individuerà il Comitato Tecnico Scientifico (CTS) responsabile della specifica strumentazione che in ragione della complessità della stessa è formato dal coordinatore del progetto, dai coproponenti e da un numero variabile di membri individuati tra i proponenti. Per la presente strumentazione, si ritiene che tale Commissione debba essere formata almeno da altri due esperti di spettrometria di massa e cromatografia liquida, tecnica con cui lo strumento è combinato. Del CTS farà parte anche il personale non permanente che sarà dedicato alla gestione giornaliera dello strumento. Il CG definisce e approva la lista degli utenti esperti che hanno fatto un addestramento adeguato sull'uso dello strumento.

Il CG, sulla base dei dati forniti dal CTS, trascorso un periodo transitorio di sei mesi di funzionamento dello strumento, emanerà il canone definitivo per l'uso dello strumento, assumendo come punto di partenza le tariffe qui proposte. Il tariffario di utilizzazione sarà differenziato per le diverse possibili tipologie di utenti.

Gli utenti potranno accedere allo strumento versando una quota associativa (membership) che permetterà l'uso per un determinato tempo macchina.

I proventi derivanti dalle quote associative, dall'utilizzo degli utenti interni a Sapienza e da utenti esterni appartenenti ad altre università, enti o industrie, dovranno coprire i normali costi di gestione (materiali di consumo, costi dei servizi, e similari), di manutenzione ordinaria e programmata della

strumentazione, acquisto di ulteriori accessori, aggiornamento del software, partecipazione del personale addetto alla strumentazione a corsi e congressi specialistici. Inoltre, i costi di utilizzazione dovranno coprire anche il costo di un contratto di ricerca per staff non permanente. Lo staff non permanente avrà il compito di supporto agli utenti. Il supporto consiste nel programmare in dettaglio gli esperimenti, effettuare l'acquisizione di dati e l'elaborazione degli stessi. Quando richiesto, lo staff dovrà anche occuparsi della preparazione dei campioni preliminarmente all'analisi, il cui costo dipenderà dalla complessità della procedura.

Attualmente questa funzione è assicurata da un PostDoc, con competenze tecniche e con addestramento specifico.

Le entrate derivanti dall'utilizzo della strumentazione verranno assegnate su due progetti contabili, uno di natura istituzionale per incassare le entrate provenienti da utenti (in forma singola e di struttura) interni a Sapienza e uno di natura commerciale per incassare le entrate provenienti da utenti (in forma singola e di struttura) esterni a Sapienza.

### **Compiti del CTS**

Il CTS dovrà sovrintendere al funzionamento della macchina, garantendone l'efficienza e sorvegliando sul corretto impiego da parte degli utilizzatori, e sarà responsabile della manutenzione dell'apparecchiatura.

Sia per il cospicuo impegno finanziario che richiede, sia per la molteplice varietà delle possibili configurazioni, in funzione della specifica preparativa che si dovrà effettuare, la strumentazione deve essere intesa come una "facility" sperimentale a disposizione anche di altri utenti in aggiunta ai partecipanti alla presente richiesta di finanziamento e al progetto del Laboratorio.

L'impegno è comunque quello di ridurre al minimo le formalità, mantenendo gli adempimenti richiesti allo stretto necessario per il corretto ed efficiente svolgimento dell'attività sperimentale dei diversi gruppi interessati all'utilizzo della strumentazione.

L'elevato numero di attività di ricerca coinvolte nell'uso della strumentazione richiesta renderà prioritario l'obiettivo di garantire il suo utilizzo al massimo numero di utenti; ciò comporterà che l'accesso alla strumentazione dovrà essere necessariamente organizzato e programmato per garantire il massimo tempo di utilizzo. I membri del CTS rimangono in carica per tre anni.

Sono in corso la realizzazione di un sito web con un sistema di prenotazione on line mediante un accesso protetto, meglio specificato nel seguito.

### **Tariffe di utilizzo.**

Il costo delle analisi dipende dai seguenti fattori:

- tipo di campione e dal pretrattamento richiesto;
- numero di analiti e relativi dati da analizzare;
- tipologia di acquisizioni da effettuare;
- analisi cromatografica, quando richiesta;
- sviluppo e validazione di un metodo LC-MS per analisi quantitative.

Per i singoli membri e le strutture della Sapienza le tariffe per le diverse modalità di analisi sono le seguenti:

- acquisizione spettro (full scan e product ion scan) in infusione: 20 € cadauno;
- analisi UHPLC-MS: 100 € cadauna, fino a 5 analiti
- analisi UHPLC-MS: 200 € cadauna, fino a 10 analiti
- analisi UHPLC-MS: 300 € cadauna, fino a 20 analiti
- preparazione del campione: 100-300 € in funzione della complessità del campione.
- sviluppo e validazione di un metodo UHPLC-MS: 3000-9000 €, dipendendo dal numero di analiti.

Per Enti di ricerca e altre università si applicano i seguenti costi:

- acquisizione spettro (full scan e product ion scan) in infusione: 30 € cadauno;
- analisi UHPLC-MS: 130 € cadauna, fino a 5 analiti
- analisi UHPLC-MS: 260 € cadauna, fino a 10 analiti
- analisi UHPLC-MS: 390 € cadauna, fino a 20 analiti
- preparazione del campione: 150-400 € in funzione della complessità del campione.
- sviluppo e validazione di un metodo UHPLC-MS: 5000-12000 €, dipendendo dal numero di analiti.

Per le industrie si applicano i seguenti costi:

- acquisizione spettro (full scan e product ion scan) in infusione: 50 € cadauno;
- analisi UHPLC-MS: 250 € cadauna, fino a 5 analiti
- analisi UHPLC-MS: 500 € cadauna, fino a 10 analiti
- analisi UHPLC-MS: 750 € cadauna, fino a 20 analiti
- preparazione del campione: 250-750 € in funzione della complessità del campione.
- sviluppo e validazione di un metodo UHPLC-MS: 7000-15000 €, dipendendo dal numero di analiti.

## UTILIZZO DELLA PIATTAFORMA

L'utilizzo della strumentazione è consentito solo al tecnico abilitato e ad utenti esperti abilitati. E' obbligatorio aver seguito il corso di formazione.

Il CG definisce e approva la lista degli utenti esperti sulla base di comprovata esperienza maturata nell'utilizzo.

E' stato istituito un sito web del laboratorio (<http://w3.uniroma1.it/sapienzahrmslab>) e sarà possibile accedere alla sezione dedicata alla prenotazione degli strumenti. I moduli per la richiesta di membership e le norme di utilizzo e frequenza del Laboratorio saranno disponibili sul sito (si allega un facsimile del modulo a questo documento).

Coloro i quali avranno attivato una membership, potranno accedere a tale sezione mediante username e password.

Per una oculata gestione della strumentazione è prevista una prima fase di prenotazione in cui l'utente presenta un piccolo progetto a cui verrà assegnato un codice. Nel progetto devono essere specificati:

- Tipologia di campione (campione da pretrattare, estratto di un campione reale, prodotto/intermedio di sintesi, molecola stabile/labile, polare/apolare)
- Tipo di solventi utilizzati (preferibilmente devono essere solventi purissimi per MS; vanno esclusi solventi dipolari aprotici quali dimetilsolfossido e dimetilformammide)
- l'eventuale presenza di sali o tamponi (assenza di sali quali NaCl, di acidi o basi forti quali ad esempio HCl e NaOH, o tamponi fosfato scarsamente volatili; le sorgenti API (ESI e APCI) tollerano sali quali formiato/acetato di ammonio, acidi e basi volatili, quali ad esempio acido formico e trimetilammina; le concentrazioni non devono essere superiori a 10 mM).

Nel caso di analisi di estratti da campioni reali o prodotti di sintesi, la soluzione da analizzare deve essere limpida e priva di particelle in sospensione.

Le richieste vanno inoltrate all'indirizzo e-mail del referente che cura l'affidamento della misura al tecnico preposto oppure all'utente incaricato.

Le richieste vengono accolte in ordine di tempo. Solo in caso di un numero elevato di domande sono previsti turni che consentano una opportuna alternanza.

Nel sito, sarà disponibile una scheda da compilare riguardante:

- il rischio chimico
- il rischio biologico
- lo smaltimento dei campioni

All'utente verranno forniti consigli e descrizioni del contesto dell'esperimento.

Gli utenti potranno quindi effettuare la prenotazione dello strumento di interesse nella data e fascia oraria disponibile, indicando il codice assegnato.

Tale richiesta sarà notificata al responsabile dello strumento e al tecnico dello strumento. Nel caso in cui non vengano fatti rilievi, l'utente è tenuto a presentarsi il giorno prefissato per le prove che verranno eseguite dal tecnico.

Il Laboratorio HRMSLab organizzerà anche corsi di training per l'istruzione di ricercatori che fossero interessati a conseguire l'abilitazione di utente esperto.

Nel primo anno dall'acquisizione della strumentazione si prevede che circa il 10% del tempo sarà dedicato alla necessaria messa a punto, sviluppo e test. Il tempo dedicato ai vari test di configurazioni strumentali diverse, sarà utilizzato almeno in parte per prove su campioni 'reali' (sistemi studiati da alcuni utenti).

Il Laboratorio organizzerà una banca dati con i risultati pubblicati. Gli utenti saranno invitati a menzionare nelle pubblicazioni il Laboratorio "HRMSLab" e il finanziamento del progetto "Innovative

High Resolution Mass Spectrometry Based on Dual Fragmentation Process: a New Frontier for Structure Elucidation of Chemical Systems” n. GA122181AEFBE248

Questa strumentazione, potrà giocare un ruolo importante nell'offerta formativa della nostra Università, per la possibilità di ospitare studenti in tesi di laurea, e per la formazione di dottorandi, anche stranieri. Nell'ambito dei corsi di dottorato si potranno organizzare corsi più specifici di teoria e di uso di software dedicati: SCIEX OS software, Zeno SWATH DIA.

**Richiesta di analisi MS o UHPLC/MS mediante Zeno-TOF**

Data \_\_\_\_

**Dati del Richiedente**

Nome \_\_\_\_\_

Supervisore della ricerca \_\_\_\_\_

Numero di telefono \_\_\_\_\_

Numero di stanza/laboratorio \_\_\_\_\_

E-mail: \_\_\_\_\_

**Informazioni sul campione**

ID# \_\_\_\_\_ Concentrazione dell'analita: 1-10 ng/ $\mu$ L; Volume del campione: 200  $\mu$ L per  
analisi LC-MS; 1-2 mL per analisi in infusione

% purezza \_\_\_\_\_ Solubile in \_\_\_\_\_

**Indicazioni per il trattamento del campione**

**Formula**

**Massa esatta**

Sensibile a: aria \_\_, umidità \_\_, luce \_\_, calore \_\_, altro....

Va tenuto in frigorifero? Sì \_\_\_\_, No \_\_\_\_

Pericoloso / Non pericoloso (indicare):

Tossico, infiammabile, irritante per la pelle, cancerogeno, altro (specificare)

**Restituzione del campione: sì, no**

**Struttura molecolare**

**Condizioni MS**

**Ionizzazione/selezione:** ESI; APCI

**Range di massa** da \_\_\_\_\_ a \_\_\_\_\_

**Modalità di acquisizione:**

MS positiva

MS negativa

MS tandem (ioni di interesse?)

**Condizioni LC-MS (se note)**

Ion. Mode

Solvents

Gradient

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

