

**QUI2528**      **Espectrometria de Massa**

Carga Horária Total: 3 h semanais

Créditos: 3 cr

Pré-requisito: -x-

Professor Responsável:

**OBJETIVOS**      Obter capacitação básica necessária para a interpretação de espectros de massa de compostos orgânicos obtidos por ionização química.

**EMENTA**      Introdução. O espectro de massa. O espectrômetro de massa. História. Terminologia básica: íons, picos, resolução

**PROGRAMA**      Espectrômetros de massa: a) Introdução. b) Tipos de analisadores: TOF – Tempo de voo (*Time of Flight*), Quadrupolo / *Ion trap*, Orbitrap, Quadrupolo de transmissão Magnético, FT ICR-MS – (*Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry*), IMS – espectrometria de mobilidade iônica (*ion mobility spectrometry*). c) Calibração da Escala m/z. Ionização por Impacto de elétrons (EI – *electron ionization*) Ionização química – (CI – *chemical ionization*). *Eletrospray Ionization* (ESI) e Ionização química à pressão atmosférica (APCI – *Atmospheric pressure chemical ionization*). d) Detectores. Sistema de vácuo.  
MS / MS: a) Introdução. b) Dissociação iônica. Íons metaestáveis. Dissociação ativada por colisão – CAD (*collisionally activated dissociation*). Dissociação por captura de elétrons. Dissociação por transferência de elétrons. Instrumentação para MS / MS. Espectrômetro de massa triplo-quadrupolo. Q-TOF. TOF – TOF. BEqQ – (espectrômetro híbrido; um setor magnético, B, um setor eletrostático, E, um quadrupolo de RF, q e um filtro de massa quadrupolar, Q. Dupla focalização  
Sistema de introdução de amostras: Sistemas em batelada – *Batch inlets*. Reservatório aquecido; Sonda de introdução de amostras (DIP); Pirólise. Sistemas contínuos – GC; membrana de introdução, CFS etc. Sistemas especiais  
Estratégias para interpretação de dados: Distribuição isotópica. Cluster. Análise elementar. A massa molecular. Reconhecimento de picos interferentes, ruído e contaminantes. Obtendo informações estruturais  
Ionização por Impacto Eletrônico – EI. Tipos de fragmentação. Tipos de mecanismos de fragmentação. Classes de compostos. Biblioteca de espectros  
Ionização Química – CI. *Electrospray Ionization*. MALD. GC/MS. LC/MS

**AVALIAÇÃO**      Através de trabalhos individuais, na forma de exercícios e seminários.

**BIBLIOGRAFIA PRINCIPAL**      1. McLafferty, F. W.; Turecek, F. 1993 Interpretation of mass spectra. ISBN 0-935702-25-3. 330p  
2. Silvertin, R. M.; Webster, F. X.; Kiemle, D. J. 2006. Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos. ISBN 978-85-216-1521-7. 490p

3. Lanças, F. M. 2019. Espectrometria de massas: fundamentos, instrumentação e aplicações. ISBN 978-85-7670-305-1. 356p

**BIBLIO-  
GRAFIA  
COMPLEMEN-  
TAR**

1. Sparkman, O. David. 2011. Gas Chromatography and Mass Spectrometry: a practical guide. 2nd ed. Elsevier. ISBN - 978-0-12-373628-4
2. Lundanes, Elsa; Reubsaet, Léon; Greibrokk, Tyge. 2014. Chromatography: Basic Principles, Sample Preparations and Related Methods. Wiley-VCH. ISBN - 978-3-527-67520-3
3. McMaster, M. C. 2005. LC/MS: A Practical User's Guide. Wiley-VCH. ISBN 13 978-0-471-65531-2