

Código: QO423								
Nome: Fundamentos da Espectrometria de Massas								
Nome em Inglês: Fundamentals of Mass Spectrometry								
Nome em Espanhol: Fundamentos de Espectrometría de Masas								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / Todos os períodos								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
2	-	-	-	-	-	2	15	2
Ocorrência nos Currículos: 05, 50, 63								
Pré-requisitos: QO321								
Ementa: Fundamentos experimentais, interpretação de dados e aplicações de espectrometria de massas.								
<p>Programa:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Introdução, a técnica e utilização 2. Instrumentação aspectos gerais de um espectrometro de massas 3. Tipos: Focalização direta, quadrupolar, quadrupolar com estocagem de íons "ion trap", tempo de voo e cromatografia gasosa com detetor espectrômetro de massas 4. O Espectro e massas, determinação do íon molecular, massas exatas dos elementos químicos, composição isotópica, M+1 e M+2, íons metaestáveis 5. Uso da Fórmula Molecular, número de insaturação 6. Fragmentação, homólise, heterólise, regras para previsão dos fragmentos mais intensos 7. Rearranjo e derivatização, ionização química 8. Espectro de massas e fragmentos das principais classes dos compostos orgânicos: Hidrocarbonetos; alifáticos (saturados e insaturados), aromáticos lineares, ramificados, ciclicos, alcoóis e fenóis, éteres, cetonas, aldeídos, ácidos carboxílicos, ésteres, lactonas, aminas, amidas, nitrilas, nitro compostos, nítricos e nitratos alifáticos, mercaptanas, compostos halogenados aromáticos e alguns produtos naturais 9. Cromatografia gasosa, espectrometria de massas 								
<p>Bibliografia básica</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) SILVERSTEIN, R. M.; BASSLER, G. C. & MORRIL, T. C. "Spectrometric Identification of Organic Compounds", fifth edition, John Wiley and Sons, 1991. 2) PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M. & KRIZ, G. S. "Introduction to Spectroscopy" - A Guide for Students of Organic Chemistry, Saunders Golden Sunburst Series, 1996. 3) DAVIS, R. & FREARSON, M. "Mass Spectrometry" - Analytical Chemistry by Open Learning, John Wiley and Sons, 1989. 								
<p>Bibliografia complementar</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Journal of Mass Spectrometry – Wiley Online Library 2) HOFFMANN, E.; STROOBAND, V. "Mass Spectrometry: Principles and Applications", 3º ed, John Wiley and Sons, 2007 3) GROSS, J. H. "Mass Spectrometry", 3º ed, Springer, 2017. 4) Rapid Communications in Mass Spectrometry - Wiley Online Library 5) Material complementar fornecido pelo docente 								