

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO**  
**FACULDADE DE CIÊNCIAS FARMACÊUTICAS**

**Análise Espectrométrica de Fármacos**

**2017**

**Carga horária:** 3.3.4 (15 semanas)

**Horário:** 2as feiras das 14:00 às 17:00 horas

4as feiras das 14:00 às 17:00 horas

**Horário de estudo:** 3ª feira das 8:00 às 12 horas

**OBJETIVO**

Capacitar o aluno para análise, determinação e identificação de estruturas moleculares, no que diz respeito à espectrometria de massa, espectrometria no ultravioleta, espectrometria no infravermelho e espectrometria de ressonância magnética nuclear.

**CONTEÚDO:**

Programa Teórico

- Espectrometria de massas: fundamentos teóricos, alguns mecanismos de fragmentação, interpretação de espectros e instrumentação.
- Espectrometria no ultravioleta: fundamentos teóricos, absorções de alguns cromóforos, interpretação de espectros, curva de calibração e instrumentação.
- Espectrometria no infravermelho: fundamentos teóricos, absorções de alguns cromóforos, instrumentação e interpretação de espectros.
- Espectrometria de ressonância magnética de hidrogênio: fundamentos teóricos, correlação de sinais espectrais - tipos de prótons, interpretação de espectros e instrumentação.
- Espectrometria de ressonância magnética de carbono 13: fundamentos teóricos, correlação de sinais espectrais - tipos de carbono, interpretação de espectro e instrumentação.
- Espectroscopia de ressonância nuclear em duas dimensões: fundamentos teóricos, correlação de sinais espectrais e interpretação de espectros.

### Programa prático:

- Exercícios teórico-práticos de atribuição de sinais e interpretação de espectros
- Aula prática respectiva após cada espectrometria, sempre que possível
- Seminários de tópicos relacionados às espectroscopias estudadas
- Apresentação escrita e oral de trabalho, onde o aluno receberá um fármaco para o qual deverá obter os espectrogramas na região do ultravioleta, na região do infravermelho e de  $^1\text{H}$ -RMN e  $^{13}\text{C}$ -RMN. O espectrograma de massas poderá ser o teórico. Deverá analisar os espectrogramas e relatar os picos de maneira científica.

### **AVALIAÇÃO**

- Entrega de exercícios teórico-práticos
- Apresentação de seminários
- Entrega e apresentação do trabalho final
- Frequência

### **BIBLIOGRAFIA:**

- 1 – BRAUN, S., KALINDONOSWSKI, H. O., BERGER, S. *100 ans more Basic NMR in Experiments. A Practical Course*. New York: VCH Publishers, 1997.
- 2 – CIENFUEGOS, F., VAITSMAN, D. *Análise Instrumental*. Rio de Janeiro: Interciência, 2005.
- 3 – CREWS, P., RODRÍGUEZ, J., JASPARS, M. *Organic Structure Analysis*. New York: Oxford University press, 1998.
- 4 – CURREL, G. *Analytical Instrumentation Performance Characteristics and Quality*. New York: Wiley, 2001-2003.
- 5 – FIELD, L. D., STERNHELL, S., KALMAN, J. R. *Organic Structure from Spectra*. New York: Wiley, 2002.
- 6 – JOHNSTONE, R.W.A., ROSE, M.E. *Mass Spectrometry for Chemist and Biochemists*, 2<sup>nd</sup> ed., Cambridge:Cambridge University Press, 2003.

- 7 – HORE, P.J. *Nuclear Magnetic Resonance*. Oxford Chemistry Primers Vol 32. New York,: Oxford University Press, 2006.
- 8 – NAKANISHI, K. *Infrared Absorption Spectroscopy – Practical*, 2a ed. San Francisco: HoldenDay, 1962
- 9 – PAVIA, D.L., LAMPAMAN, G.M., KRIZ, G.S. *Introduction to Spectroscopy*, Saunders Golden Sunburst Series, 3th ed., 2001.
- 10 – SILVERSTEIN, R. M., WEBSTER, F. X. *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, 7 th ed. New York: Wiley, 2005.
- 11 – SMITH, B. C. *Fundamentals of Fourier Transformed Infrared Spectroscopy*. Boca Raton: CRC Press, 2000.