



E0457

**Método Absoluto e Geral para a avaliação estrutural direta de isômeros posicionais por espectrometria de massas de estágios múltiplos ( $MS^n$ )**

Lívia Schiavinato Eberlin (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Marcos Nogueira Eberlin (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

A diferenciação de compostos isoméricos tem sido realizada em química orgânica por meio de diferentes técnicas, sendo que a espectrometria de massas (MS) tem sido uma das mais amplamente utilizadas atualmente neste estudo, em função de seu grande desenvolvimento pelo surgimento de espectrômetros de massas versáteis, rápidos, de múltiplos estágios ( $MS^n$ ), e que permitem a realização de reações em fase gasosa. Neste trabalho, foi desenvolvido um método que permite a identificação de composto isoméricos, sem ter conhecimento prévio de sua estrutura, por meio do estudo da reatividade de seus fragmentos iônicos “diagnósticos de configuração”, produzidos pela dissociação da molécula neutra, nos quais estão preservadas as informações posicionais dos substituintes. Este fragmento foi selecionado, para cada isômero, e estudado separadamente através de diferentes reações em fase gasosa. A análise dos produtos desta reação, tão quanto da dissociação dos mesmos (CID), permitiu diferenciar que isômero deu origem ao íon e portanto, diferenciá-los. O estudo foi realizado para isômeros que formam íons diagnósticos azabutadienos, íons acílios e íons acil-imínio, sendo que em grande parte dos compostos estudados foi possível fazer a diferenciação de diferentes pares de isômeros.

Espectrometria de massas - Reações orgânicas - Isômeros