

# Estudo da Técnica de Espectrometria de Massas na Identificação de Compostos Químicos

Autores: Ana Luiza Bobadilla, Aruã Hitoshi Oumori, Bernardo  
Hissa de Carvalho Leite

# UEADSL 2021/1

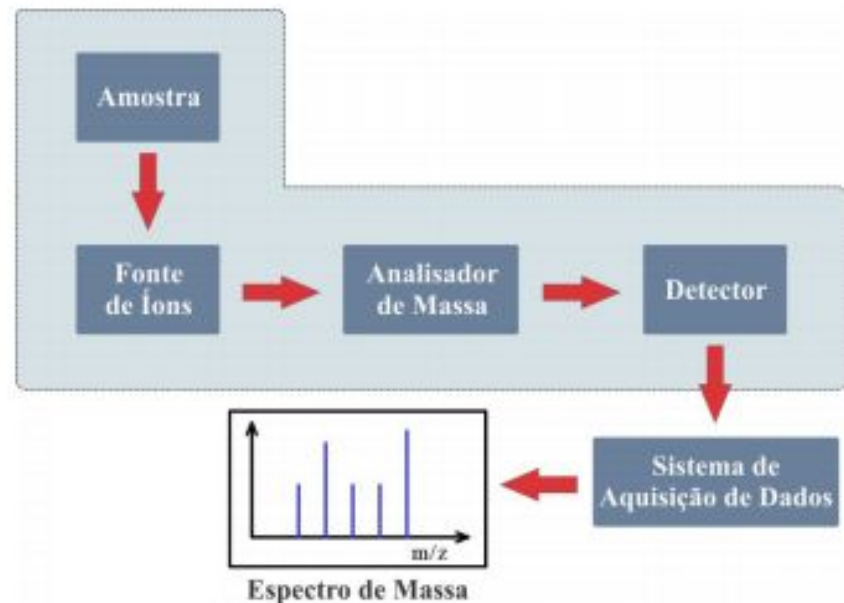


- ❖ Espaço de compartilhamento, aprendizado e crescimento;
- ❖ Estudo da Técnica de Espectrometria de Massas na Identificação de Compostos Químicos.

# Introdução - Espectrometria de Massas

❖ Técnica analítica usada na detecção e na identificação de compostos de interesse através da medição da razão massa/carga ( $m/z$ ) de íons na fase gasosa.

- Determinação do peso molecular;
- Fórmulas moleculares;
- Detecção de compostos qualitativamente e quantitativamente.



# Introdução - Aplicações

## ❖ **TÉCNICA APLICADA EM DIVERSOS RAMOS, POSSUINDO GRANDE VERSATILIDADE E RELEVÂNCIA:**

01	<b>Indústria de Biotecnologia</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Examinar e sequenciar proteínas, oligonucleotídeos e polissacarídeos.</li></ul>
02	<b>Indústria Farmacêutica</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Descoberta de compostos importantes, desenvolvimento sintético e química combinatória.</li></ul>
03	<b>Clínicas de Saúde</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Testes de sangue e urina;</li><li>• Detecção de drogas ilícitas e anabolizantes.</li></ul>
04	<b>Controle de Qualidade</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Monitorar qualidade da água e do ar;</li><li>• Testar qualidade das reservas de petróleo.</li></ul>

# Objetivos do Estudo

## ❖ REVISÃO DA TÉCNICA DE ESPECTROMETRIA DE MASSAS E ANÁLISE CRÍTICA DE TRÊS ARTIGOS QUE A UTILIZAM:

- Differentiation of the Four Major Species of Cinnamons (*C-burmannii*, *C-verum*, *C-cassia*, and *C-loureiroi*) Using a Flow Injection Mass Spectrometric (FIMS) Fingerprinting Method - (CHEN et al., 2014);
- Gas chromatography–mass spectrometry analysis of phenolic compounds from *Carica papaya* L. leaf - (CANINI et al., 2007);
- Mass spectrometry for the characterization of brewing process - (VIVIAN et al., 2016).



**Compreensão do funcionamento e relevância da técnica.**

# Introdução da Amostra

- Sonda direta;
- Espectrometria de Massas/Cromatografia Gasosa (GC-MS);
- Espectrometria de Massas/Cromatografia Líquida de Alta Performance (HPLC-MS).



Fonte: GC-MS quadrupolo. Disponível em: <https://www.analiticaweb.com.br/espectrometro-de-massa>

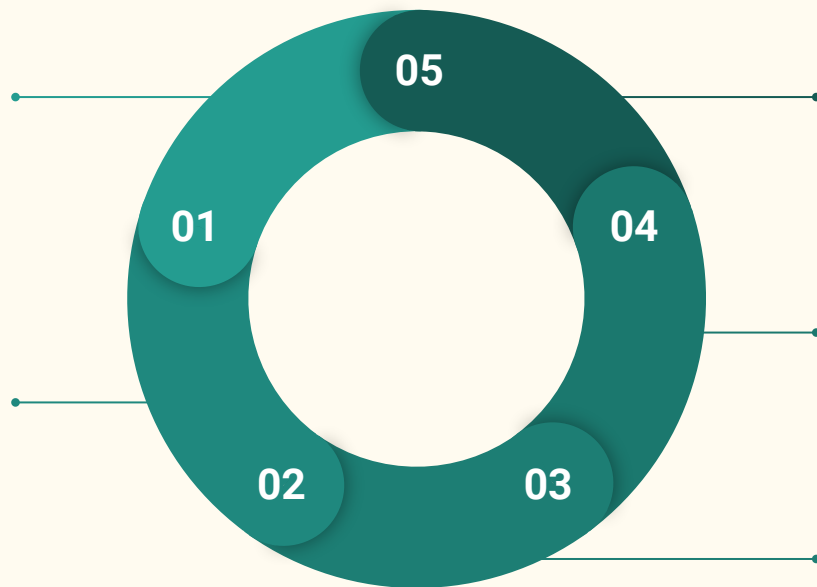
# Métodos de Ionização

## Ionização por Eletrospray (ESI)

Solvente volátil contendo analitos é bombeado através de um capilar. Alta tensão provoca a saída da amostra dispersa em um aerossol.

## Ionização Eletrônica (EI)

Feixe de elétrons produzido por um filamento e acelerado por um ânodo. Todos os analitos devem estar na forma vapor (moléculas voláteis).



## Injeção por Fluxo (FIMS)

Fluxo contínuo de um líquido transportador apropriado.

## Ionização por Bombardeamento Rápido de Átomos (FAB)

Ionização suave. Energia transferida não causa geração excessiva de fragmentos. Moléculas polares, termicamente lábeis e não voláteis.

## Ionização Química (CI)

Produção de íons pela colisão das moléculas com íons primários.

# Análise Crítica

## ❖ (CHEN et al., 2014)

- Canela: atividade antioxidante e antimicrobiana, papel na glicose e controle de lipídios;
- Espectrometria de massas por injeção de fluxo (FIMS): diferenciar amostras das quatro espécies de canela;



- Espectro FIMS:
  - Diferenças visuais óbvias, mesmo sem o uso da cromatografia;
  - Composição química: proantocianidinas (potencial benefício à saúde devido à atividade antioxidante);
  - Importância para a atividade biológica no organismo.
- Análise de componentes principais (PCA):
  - Aumento da robustez da análise;
  - Rápido tempo de desenvolvimento e análise.



# Análise Crítica

## ❖ (CANINI et al., 2007)

- Análise química dos extratos de folhas de *Carica papaya* - GC-MS;
  - Dimetoxicumarina, ácido protocatecúico, ácido p-cumárico, ácido cafeico, ácido clorogênico, kaempferol e quercetina;
  - Ácidos fenólicos: propriedades antioxidantes na prevenção de doenças degenerativas (como aterosclerose e câncer);
  - Dimetoxicumarina: propriedades anti-bacterianas, anti-asmáticas, anti-mutagênicas e anti-inflamatórias



## ❖ (VIVIAN et al., 2016)

- Caracterização de substâncias: maltagem, maceração, fervura, fermentação e maturação - ESI/HRMS;
- Análise multivariada de dados (PLS-DA): definir os marcadores.
  - Componentes de cevada, peptídeos, teor de lúpulo, compostos metabólicos de leveduras, compostos aromatizantes e precursores de sabor desagradável;
  - Minimizar custos, garantir a qualidade e auxiliar no controle de sabor, estabilidade da espuma e potabilidade.



# Conclusão

- ❖ Compreensão do funcionamento da espectrometria de massas e seus principais métodos de ionização;
- ❖ Vasta aplicabilidade da técnica:
  - Saúde;
  - Alimentos;
  - Controle de qualidade.
- ❖ Eficácia e relevância.



Obrigado!