



UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS DA SAÚDE
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS FARMACÊUTICAS
PROGRAMA DE EDUCAÇÃO TUTORIAL (PET – FARMÁCIA)

**CONSULTORIA ACADÊMICA – DISCIPLINA: MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS
APLICADOS À ANÁLISE DE FÁRMACOS E MEDICAMENTOS**

Bolsista: Isabelle de Farias Oliveira – Graduanda do 8º período

Orientada por: Prof. Dr. Josean Fechine Tavares

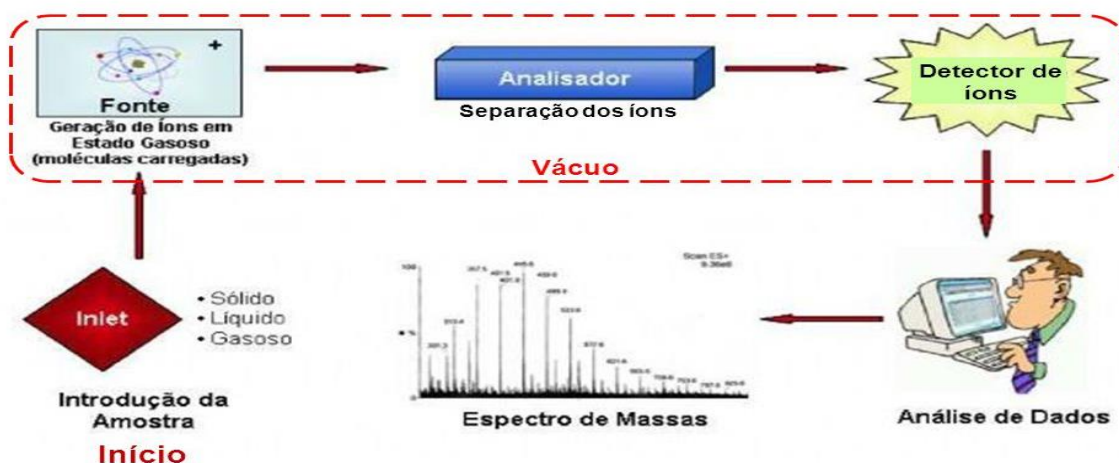
**ESPECTROMETRIA DE MASSAS E SUA APLICAÇÃO NAS CIÊNCIAS
FARMACÊUTICAS**

A espectrometria de massas (MS) consiste em uma técnica analítica que possibilita a identificação de substâncias químicas desconhecidas, assim como a quantificação e a elucidação de propriedades químicas e estruturais de compostos orgânicos e inorgânicos. Uma das vantagens desse método é que este utiliza pequenas quantidades de amostra, na unidade de picogramas, além de ser uma técnica mais rápida e com maior sensibilidade e seletividade (PAVIA et al., 2010).

Essa técnica é fundamentada na ionização de moléculas no intuito de que as mesmas gerem fragmentos como íons carregados positivamente ou negativamente que são detectados e quantificados de acordo com a razão massa/carga (m/z). A primeira etapa consiste na ionização, no qual a amostra tem suas moléculas na fase gasosa sendo bombardeadas por um feixe de elétrons de alta energia para gerar íons. Tais íons são acelerados em direção ao analisador de massa. O analisador tem como função a separação desses íons de acordo com sua relação massa/carga. Por fim tem-se o detector que recebe os íons separados pelo analisador, transformando a corrente de íons

em sinais elétricos que são processados e dão origem ao espectro de massas (DUDLEY et al., 2010; SILVERSTEIN et al., 2012).

Figura 1: Componentes básicos de um espectrômetro de massas



Fonte: slideplayer.com.br

Ademais, o espectrofotômetro de massas está usualmente associado a outras técnicas, tais como a cromatografia gasosa, cromatografia líquida de alta eficiência e a cromatografia com fluido supercrítico no sentido de promover a separação de misturas para a introdução da amostra no sistema espectrométrico (PETERS; REMANE, 2012).

A espectrometria de massas configura-se como uma das mais importantes ferramentas analíticas disponíveis atualmente tendo em vista que fornece informações acerca da composição elementar e estrutura molecular das amostras, composição qualitativa e quantitativa de compostos complexos e de superfícies sólidas ou de proporções isotópicas de átomos em amostras, além de permitir o estudo da cinética e do mecanismo de reações (SKOOG et al., 2007).

O emprego dessa técnica compreende a identificação e quantificação de biomoléculas como carboidratos, ácidos nucleicos e esteroides, o sequenciamento de biopolímeros como proteínas e oligossacarídeos, as análises de quantificação de abuso de drogas e de contaminantes ambientais e a determinação da idade e origens de espécies em geoquímica e arqueologia (EBERLIN, 2011).

Dentre o campo das ciências farmacêuticas sua aplicação inclui a determinação de esteroides androgênicos e seus produtos de degradação em urina com a finalidade de controle do *doping* no esporte (CAMPOS et al., 2005), no controle de qualidade de uma

organoargila utilizada como matriz de liberação prolongada de fármacos (DORNELAS et al., 2008), no controle de qualidade de fármacos sintéticos a exemplo do diclofenaco sódico (SOUZA; FERRÃO, 2006), na determinação e monitoramento de metais tóxicos em amostras de plasma (NUNES, 2009), no controle de qualidade de fitoterápicos e na identificação de componentes medicinais em plantas (SOUZA; SALGADO; PIETRO, 2010).

Tal técnica espectroscópica também possibilita a determinação do perfil farmacológico e farmacocinético de determinados fármacos, a exemplo do retinóide isotretinoína. Diniz e colaboradores (2002) utilizaram a espectrometria de massas acoplada a cromatografia líquida de alta eficiência para avaliar a estabilidade desse fármaco e sua caracterização físico-química, constatando que as alterações desses fatores se dão em razão da exposição desse produto ao oxigênio atmosférico, luz, umidade e altas temperaturas.

Nos últimos anos a MS acoplada a técnicas cromatográficas vem se destacando no âmbito das ciências forenses. Teixeira (2008) utilizou a cromatografia líquida e a gasosa acoplada a espectroscopia de massas para a triagem de canabinóides em amostras biológicas. Alves (2010) avaliou a presença de crack e seus metabólitos em amostras de mecônios (primeira fezes do recém-nascido) obtendo espectros com alta precisão.

Na indústria cervejeira também há a aplicação dessa técnica. Vivian (2016) utilizou a espectrometria de Massas em combinação com a análise estatística multivariada para estabelecer marcadores das etapas principais de transformação da cerveja visando o controle de sua qualidade e produtividade.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALVES, M. **Desenvolvimento de validação de metodologia para análise de cocaína, derivados e metabólitos em amostras de mecônio utilizando a Cromatografia em fase Gasosa acoplada à Espectrometria de massas**. Dissertação (Mestrado em Ciências Farmacêuticas) - Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2010.

CAMPOS, D. R. et al. Determinação de esteróides androgênicos anabólicos em urina por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas. **Revista Brasileira de Ciências Farmacêuticas**, v. 41, n. 4, p. 467-476, 2005.

DINIZ, Danielle Guimarães Almeida; LIMA, Eliana Martins; ANTONIOSI FILHO, Nelson Roberto. Isotretinoína: perfis farmacológico, farmacocinético e analítico. **Revista Brasileira de Ciências Farmacêuticas**, v. 38, n. 4, p. 415-430, 2002.

DORNELAS, Camila B. et al. Avaliação de derivados poliméricos intercalados em montmorilonita organofílica na preparação de novos materiais de uso farmacêutico. **Polímeros: Ciência e Tecnologia**, v. 18, n. 3, 2008.

DUDLEY, E. et al. Targeted metabolomics and mass spectrometry. **Advances in Protein Chemistry and Structural Biology**, Amsterdam, v. 80, p. 45 - 83, 2010

EBERLIN, M. N. **Técnicas modernas em espectrometria de massas e desenvolvimento de novas aplicações em ciências: química, bioquímica, materiais, forense, medicina, alimentos, farmácia e veterinária**. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2011.

NUNES, Juliana Andrade. **Desenvolvimento de método para determinação de Ag, As, Cd, Co, Mn, Ni, Pb e Se em sangue por espectrometria de massas com fonte de plasma acoplado indutivamente (ICP-MS) utilizando diluição das amostras em meio alcalino**. Tese (Doutorado em Toxicologia) - Universidade de São Paulo, São Paulo, 2011.

PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. R. **Introdução a Espectroscopia**. 4. ed. São Paulo, 2010.

PETERS, F. T.; REMANE, D. Aspects of matrix effects in applications of liquid chromatography–mass spectrometry to forensic and clinical toxicology—a review. **Analytical and bioanalytical chemistry**, v.403.8, p. 2155-2172, 2012.

SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. **Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos**. 7 Ed. Rio de Janeiro: LTC Editora. 2012.

SKOOG, D. A. et al. **Fundamentos da Química Analítica**. São Paulo, Ed.Thomson, 2007.

SOUZA, J. S.; FERRÃO, M. F. Aplicações da espectroscopia no infravermelho no controle de qualidade de medicamentos contendo diclofenaco de potássio. Parte I: dosagem por regressão multivariada. **Revista Brasileira de Ciências Farmacêuticas**, v. 42, n. 3, p. 437-445, 2006.

SOUZA, T. M.M.; SALGADO, H. R. N.; PIETRO, R. C. L. R. O Brasil no contexto de controle de qualidade de plantas medicinais. **Revista Brasileira de Farmacognosia**, v. 20, n. 3, p. 435-440, 2010.

TEIXEIRA, H. M. S. R. **Determinação de canabinóides em amostra biológica por cromatografia líquida de alta resolução com espectrometria de massa: Aplicação em toxicologia forense**. Tese (Doutorado em Ciências Biomédicas) - Universidade de Coimbra, Coimbra, 2008.

VIVIAN, A.F. **Caracterização do processo de produção de cerveja através de espectrometria de massas**. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, 2016.