

Opinião  
seg, 4 de Julho de 2011

## **Espectrometria de Massa: Dos átomos aos seres vivos**

### **Nota da redacção**

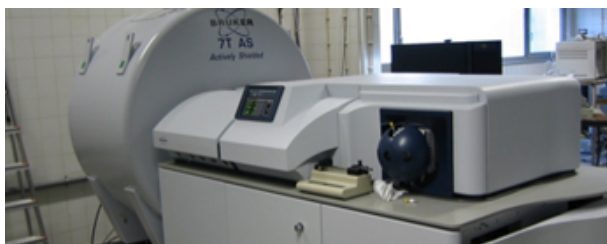
Durante o Ano Internacional da Química, a info-Ciências digital publica uma série de artigos sobre essa ciência fundamental. O quarto artigo é dedicado à espectrometria de massa, cuja capacidade analítica tem sido celebrizada por aplicações no domínio forense em séries televisivas de grande expressão como Crime Scene Investigation (CSI).

### **Por Carlos Cordeiro\***

A espectrometria de massa teve a sua origem nas investigações sobre a constituição da matéria realizadas em finais do século XIX com os raios catódicos por J. J. Thompson. Pela descoberta do electrão, Thompson foi agraciado com o prémio Nobel da Física em 1906.

O seu discípulo Aston recebeu em 1922 o prémio Nobel da Química pela descoberta dos isótopos. A capacidade de manipular iões em fase gasosa usando campos eléctricos e magnéticos permite determinar a sua razão massa/carga ( $m/z$ ) e, consequentemente, investigar a sua constituição usando a propriedade mais fundamental da matéria, a massa.

A espectrometria de massa permite, enquanto técnica analítica, determinar a composição elementar de moléculas e consequentemente proceder à sua identificação em misturas complexas e em quantidades vestigiais. Esta capacidade analítica tem sido celebrizada por aplicações no domínio forense em séries televisivas de grande expressão como Crime Scene Investigation (CSI). O equipamento mais usado nesta série, o cromatógrafo gasoso acoplado a um analisador de massa (GC-MS) é dos mais ubíquos em laboratórios de química, tendo sido criado por Fred McLafferty e Gohlk nos anos 50. Também nos anos 50 ocorreu uma descoberta que revolucionou a espectrometria de massa e a investigação nos domínios da biologia e bioquímica: a elucidação da estrutura do DNA e do seu mecanismo de replicação (Watson e Crick, Prémio Nobel da Medicina 1963).



Carlos Cordeiro

Com a resolução do código genético por Nirenberg, Khorana e Holley (Nobel da Medicina e Fisiologia em 1968) foi possível estabelecer uma relação entre o genoma e as proteínas por ele codificadas, o proteoma. O proteoma é o conjunto de todas as proteínas presentes num dado instante numa célula que definem o seu fenótipo e a sua funcionalidade. Numa levedura, aproximadamente 6000 proteínas são codificadas enquanto o genoma humano codifica cerca de 20000. Não somente é possível determinar a massa molecular exacta de cada uma destas proteínas como também conhecer a sequência de resíduos de aminoácidos que a identifica.

Para a análise das proteínas por espectrometria de massa, os métodos de ionização então conhecidos eram absolutamente inúteis. Não só a sua massa molecular é muito superior à das moléculas orgânicas e inorgânicas tradicionalmente estudadas em química, como são incompatíveis com métodos de ionização da época. A ionização por electrospray (ESI) e a ionização associada a desorção por laser (MALDI) permitiram resolver este problema, preservando a estrutura primária destas moléculas (Fenn e Tanaka, Nobel da Química 2002).

Finalmente, Peter Roepstorff (ainda não é Nobel!) descobriu a relação entre sequência e padrão de fragmentação de péptidos e proteínas, abrindo caminho para a proteómica, a identificação e quantificação em larga escala do proteoma. Na actualidade, um dos principais desafios da espectrometria de massa consiste em preservar a estrutura terciária e quaternária de proteínas e outras moléculas

biológicas e, em particular, de complexos macromoleculares como o proteassoma, ribossomas e vírus de modo a investigar a sua composição e estrutura. Neste domínio, os trabalhos de Carol Robinson, Albert Heck e Michal Sharon constituem o seu expoente máximo. No Futuro... conseguiremos analisar células e organismos intactos para além dos vírus?

#### **Nota final**

A imagem representa o espectrómetro de massa de ressonância ciclotrónica de ião com transformada de Fourier do [laboratório de FTICR e Proteómica de Precisão da FCUL](#). Este instrumento de alta resolução e massa exacta permite determinar a composição elementar de moléculas. É o principal equipamento da [Rede Nacional de Espectrometria de Massa](#) e uma das suas principais aplicações é a caracterização e sequenciação de proteínas bem como a análise de proteomas. É um dos equipamentos que suportam a participação de Portugal na iniciativa europeia [INSTRUCT](#), An Integrated Structural Biology Infrastructure for Europe. [\[■\]](#) \*  
**Investigador do Centro de Química e Bioquímica da Universidade de Lisboa**

Imprimir

Cancelar