

Caracterização qualitativa de drogas ilícitas utilizando espectroscopia vibracional (Infravermelho e Raman).

Humberto Costa Garcia (PG)*¹, Antônio Marques Da Silva Júnior(PG)², Hélio Ferreira dos Santos (PQ)²
Luiz Fernando C. de Oliveira (PQ)¹. betimquimica@yahoo.com.br

Departamento de Química – ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora – MG, 36036-330.

¹NEEM (Núcleo de Espectroscopia e Estrutura Molecular) ²NEQC(Núcleo de Estudos em Química Computacional)

Palavras Chave: OMS, drogas ilícitas, Espectroscopia Infravermelho e Raman.

Introdução

A Organização Mundial de Saúde (OMS) define como droga todo e qualquer tipo de substância natural ou sintética capaz de modificar psicológica ou fisicamente o organismo vivo. No Brasil as drogas são divididas em dois grandes grupos: as drogas lícitas, que possuem a sua comercialização permitida pelo governo, e as ilícitas, que possuem a venda proibida, devido à dependência química que proporcionam e o grande efeito tóxico que podem ocasionar com a intensidade do seu uso.

Dentre as mais utilizadas destacam-se as drogas naturais como a maconha e o haxixe (**Cannabis sativa**) e a cocaína e crack (**Erythroxylon coca**). Existem também as drogas sintéticas, como o ecstasy (MDMA) e o LSD (dietilamida do ácido lisérgico). Existem vários estudos na literatura sobre caracterização dessas drogas; entretanto a caracterização vibracional ainda é incipiente¹.

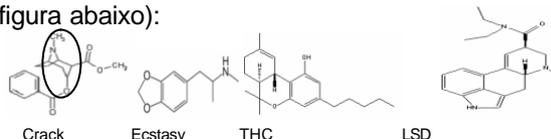
Todas essas drogas citadas acima foram apreendidas na cidade de Juiz de Fora – MG, e amostras destas foram cedidas pela Polícia Civil para as medidas de Infravermelho e Raman. Os resultados obtidos para a cocaína, crack e ecstasy foram comparados com dados presentes na literatura¹⁻², e para maconha, haxixe e LSD foi feito um estudo comparativo através de cálculos teóricos.

Resultados e Discussão

Os espectros Raman foram obtidos utilizando um instrumento Bruker RFS 100 com laser de Nd³⁺/YAG, operando em uma linha de excitação de 1064nm, utilizando uma resolução de 4 cm⁻¹ e 512 scans. Os espectros de infravermelho foram obtidos através de um equipamento Bomem MB-102, utilizando como suporte pastilhas de KBr e a técnica de ATR. A resolução foi de 4 cm⁻¹ para uma região compreendida entre 4000 – 400 cm⁻¹ e a acumulação de 128 scans.

Os espectros de infravermelho e Raman do crack apresentam bandas em regiões específicas, que quando comparados com dados da literatura podem ser atribuídos como sendo: 1716 cm⁻¹ vCO e 1278 e

1455 cm⁻¹ específicos do grupo tropano (circulado na figura abaixo):



Os espectros da cocaína (o sal puro do crack) apresentam as bandas um pouco deslocadas, mas com o mesmo perfil, em 1720 cm⁻¹ (vCO) e em 1275 e 1450 cm⁻¹ (grupo tropano). Os espectros de infravermelho e Raman do comprimido de ecstasy apresentam bandas na região de 1490 cm⁻¹ e 1245 cm⁻¹ referentes ao estiramento do anel e vCO, respectivamente.

A atribuição dos modos vibracionais para o princípio ativo da maconha e do haxixe, conhecido como THC, foi feito através de dados teóricos, utilizando cálculo DFT, com o funcional B3LYP e conjunto de funções de base 6-31G*. Os espectros experimental e teórico apresentaram o mesmo perfil geral de bandas, apesar do deslocamento das mesmas, podendo ser atribuída a banda em 1622 e 1580 cm⁻¹ aos modos vCC_(aromático) e em 1050 cm⁻¹ a vCO_(éter) (valores experimentais). O espectro do LSD processado do mesmo modo apresenta uma banda em 1612 cm⁻¹, atribuída ao modo vCO.

Conclusões

Através dos resultados percebe-se que a espectroscopia pode ser utilizada como uma ferramenta analítica na determinação e caracterização de drogas ilícitas, apresentando como vantagens a utilização de uma pequena quantidade de amostra, resultados rápidos e a não destruição da amostra, no caso das medidas Raman.

Agradecimentos

CNPq, FAPEMIG, CAPES, Polícia Civil-MG.

¹ Sägmüller, B.; Schwarze, B.; Brehm G. J. Molecular Structure 661-662 (2003) 279-290.

² Praisler, M.; Bocxlaer, J. V.; Leenheer, A. Journal of Chromatography A 962 (2002) 161-173.