

## Análise quimiométrica de espectros de IV e quantificação por GC-MS de amostras de cocaína apreendidas em Minas Gerais

Nathália V. S. Rodrigues<sup>1</sup> (IC), Eduardo M. Cardoso<sup>2</sup> (PQ), Marcus Vinícius O. Andrade<sup>2</sup> (PQ), Cláudio L. Donnici<sup>1</sup> (PQ) e Marcelo M. Sena<sup>1</sup> (PQ)\*, marcsen@ufmg.br

<sup>1</sup>Depto. de Química, ICEx, UFMG, Av. Antônio Carlos 6627, Belo Horizonte/MG, 31270-901

<sup>2</sup>Polícia Federal, S. R. de Minas Gerais, R. Nascimento Gurgel 30, Belo Horizonte/MG, 30430-340

Palavras chave: Drogas Ilícitas, Quimiometria, PCA, Infravermelho médio, GC-MS.

### Introdução

A cocaína é uma das drogas ilícitas mais consumidas no mundo, movimentando cerca de US\$ 50 bilhões/ano. Estima-se que 41% de toda essa produção seja apreendida. Diante desse quadro, projetos com o objetivo de traçar o perfil químico das drogas apreendidas são de grande importância no estabelecimento de suas características de origem, processamento, tráfico e pureza. Combinados com os resultados de investigações criminais, esses dados podem ser usados para estabelecer conexões entre quadrilhas e fornecedores, traçar rotas de tráfico e identificar quais produtos químicos devem ser prioridade de controle em cada região do país. O objetivo deste trabalho foi traçar o perfil químico de amostras de cocaína apreendidas nos últimos 3 anos em Minas Gerais. Para isso, a PCA foi aplicada a espectros de IV de amostras de droga visando o reconhecimento de padrões químicos e similaridades entre elas, bem como a cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (GC-MS) foi usada na determinação do teor de cocaína em cada amostra.

### Resultados e Discussão

Foram obtidos espectros de infravermelho médio (500 a 4000  $\text{cm}^{-1}$ ) de 91 amostras de cocaína apreendidas pela Polícia Federal em todo o Estado de MG, entre os anos de 2008 a 2010. Foi usado um espectrômetro Nicolet FT-IR com acessório de refletância total atenuada. Para a determinação do teor de cocaína nas amostras utilizou-se um cromatógrafo gasosa Agilent 6890N acoplado a um detector de massa seletivo Agilent 5973 e um amostrador automático Agilent 7693A. Foi utilizada uma coluna DB-5MS e hélio como fase móvel.

Um aspecto de interesse neste trabalho é a forma química em que a cocaína foi apreendida, pois ela pode ser comercializada como sal, tal como cloridrato de cocaína (mais comum), ou na forma de cocaína não ionizada, como cocaína-base ou crack. Por isso, foram obtidos também espectros de duas amostras padrão, uma de cloridrato de cocaína e outra de cocaína não ionizada, para fins de comparação. Dessa forma, foi construída uma

matriz de dados 93 x 1803 (amostras x comprimentos de onda), que foi tratada pela PCA usando o programa Matlab e o pacote PLS\_Toolbox. Para a correção dos desvios de linha base dos espectros, os dados foram pré-tratados usando SNV (*Standard Normal Variate*) e centrados na média. Duas componentes principais explicaram 60,95% da variância e o gráfico de escores está representado na Fig. 1, na qual estão destacadas as amostras 92 (cocaína não ionizada) e 93 (cloridrato de cocaína). A CP1 foi capaz de separar as amostras de maior pureza, contendo de cerca de 15 a 74% de cocaína, das amostras de menor pureza, com teor de cocaína inferior a 15%. Esta quantificação foi feita por GC-MS. Além disso, os principais adulterantes foram identificados como cafeína, lidocaína e ácido bórico, através de uma análise qualitativa por GC-MS e de seus espectros de IV. A CP2 discriminou dentre as amostras de cocaína mais puras, as que estavam na formas de cloridrato e de base livre.

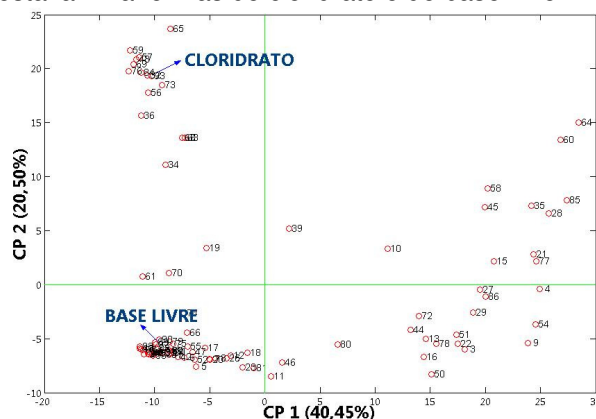


Figura 1. Gráfico de escores CP1XCP2.

### Conclusões

O uso conjunto da PCA e de espectros de IV médio estabeleceu um método alternativo, rápido e não destrutivo para discriminar as amostras mais puras, com teor de cocaína de 15% a 74% determinado por GC-MS, das amostras mais adulteradas, com teor de cocaína menor que 15%. Os principais adulterantes identificados foram cafeína, lidocaína e ácido bórico. Além disso, foi possível separar as amostras na forma química cloridrato de cocaína das amostras de cocaína não ionizada.