

Determinação de drogas ilícitas em águas naturais por cromatografia líquida acoplada à espectrometria de massas *in tandem*.

Marco Antonio F. Locatelli (PG)¹, Fernando F. Sodré (PQ)^{2*}, Adriano O. Maldaner (PQ)³ e Wilson F. Jardim (PQ)¹. *ffsodre@unb.br.

1. Instituto de Química, Universidade de Campinas, CP 6154, 13084-862 Campinas, SP.

2. Instituto de Química, Universidade de Brasília, CP 4478, 70904-970 Brasília, DF.

3. Instituto Nacional de Criminalística, Departamento de Polícia Federal, SAIS Qd 7 Lt 23, 70610-200 Brasília, DF.

Palavras Chave: Águas naturais, drogas ilícitas, LC-MS/MS, triplo quadrupolo, cocaína.

Introdução

Um usuário de drogas acredita que não deixa vestígios, mas seu organismo pode excretar parte da droga consumida, além de produtos de metabolização. Assim, dependendo do destino do esgoto bruto, drogas ilícitas podem ser detectadas em diferentes matrizes ambientais.

A ocorrência destes contaminantes emergentes em águas naturais tem sido objeto de investigações recentes, seja em função de seus efeitos ainda desconhecidos frente aos baixos níveis detectados ou ainda como ferramenta para nortear ações de combate ao consumo e ao tráfico de drogas.

Este trabalho buscou desenvolver um método para investigar a ocorrência de drogas ilícitas em matrizes ambientais, notadamente, águas naturais.

Parte Experimental

Onze compostos foram selecionados: morfina (MO), morfina-6-glicuronídeo (MOG), 6-acetil-morfina (6AM), anfetamina (AN), metanfetamina (MAN), 3,4-metilenodioxiamfetamina (MDA), 3,4-metilenodioximetamfetamina (MDMA), 3,4-metilenodioxietilamfetamina (MDEA), benzoilecgonina (BE), cocaína (COC), e metadona (ME)

A extração em fase sólida (SPE) foi realizada com cartuchos HLB Oasis (Waters) condicionados com metanol. A extração foi investigada em três valores de pH da amostra, a saber, 2,5, 7,0 e 10,6. Testes de recuperação foram realizados em amostras (0,5 L) de água de rio (200 ng L⁻¹) e água ultrapura (50 ng L⁻¹). Após extração (5 mL min⁻¹), os compostos foram eluídos, os extratos foram secos com N₂ e ajustados para 1,00 mL com água:metanol 90:10.

A separação cromatográfica (Zorbax SB-C18, 30mm×2,1mm×3,5µm, FM gradiente água:metanol) foi realizada em um cromatógrafo líquido Agilent 1200. A determinação foi realizada no modo MRM (*multiple reaction monitoring*) em um espectrômetro de massas em triplo quadrupolo (Agilent 6410) equipado com fonte *electrospray* (ESI). Três transições precursor-produto foram selecionadas para cada composto. Parâmetros instrumentais (MRM e ESI) foram otimizados para obtenção da melhor capacidade de detecção possível.

34^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Resultados e Discussão

Os parâmetros MRM selecionados para cada composto permitiram a obtenção de limites de detecção de até 0,1 ng L⁻¹. Os testes de recuperação em água ultrapura (Milli-Q) e em amostras do Rio Atibaia (Campinas, SP) revelaram que o pH foi variável determinante. Índices de recuperação entre 78 e 130% foram obtidos para todos os compostos em pH 2,5, com exceção das anfetaminas AN e MAN e das morfinas MO e MOG. As anfetaminas AN e MAN apresentaram índices intermediários (20-40%) em todas as faixas de pH para as amostras de rio, enquanto que para a água ultrapura, índices de até 65% foram observados em pH neutro. As morfinas apresentaram índices de recuperação satisfatórios (77-120%) nas amostras de água de rio apenas em pH 10,6.

Doze amostras do Rio Atibaia foram coletadas para a construção de perfis semanal e diário envolvendo a presença das drogas estudadas. As extrações foram realizadas em pH 2,5. COC e BE, principal metabólito da cocaína, foram detectadas em 100% das amostras (12 a 43 ng L⁻¹). O perfil semanal mostrou picos de concentração no domingo e vales na terça-feira. Este comportamento pode ser reflexo do elevado consumo da droga nos finais de semana. O perfil diário mostrou picos de concentração no meio da tarde e vales no início da manhã. Neste caso, deve-se considerar o tempo necessário para que o resíduo da droga atinja as águas superficiais após excreção. Acredita-se que o consumo durante a noite/madrugada pode provocar níveis elevados das drogas na parte da tarde.

Conclusões

O método foi satisfatório para a determinação da maioria dos compostos investigados, com exceção de AN, MAN, MO e MOG. Foi aplicado com sucesso para determinação de drogas em águas do Rio Atibaia e pode ser utilizado, após testes adicionais, em amostras de esgoto e efluentes de ETE.

Agradecimentos

FAPESP (07/58449-2), INCTAA, Polícia Federal.