

DESENVOLVIMENTO DE METODOLOGIAS COM APLICAÇÃO DE DISPOSITIVOS MÓVEIS PARA ESTUDOS EM QUÍMICA FORENSE

ANGÉLICA DE AVILA MARTINS¹ ; CLARISSA MARQUES MOREIRA DOS SANTOS²

¹Universidade Federal de Pelotas – angelica19ch@gmail.com

²Universidade Federal de Pelotas – clafarm_mm@yahoo.com.br

1. INTRODUÇÃO

De acordo com o estudo realizado pela 31ª Pesquisa Anual do Centro de Tecnologia da Informação Aplicada (FGVcia) da Escola de Administração de Empresas de São Paulo da Fundação Getúlio Vargas (FGV EAESP), no ano de 2020 no Brasil há mais de um *smartphone* por habitante. Ainda conforme a pesquisa, existem cerca de 234 milhões de *smartphones* no país. A facilidade de compra, o emprego para diversas finalidades e as facilidades geradas por certos aplicativos motivam o aumento de volume na compra de novos aparelhos. Desta forma, os *smartphones* têm se tornado item indispensável na vida dos brasileiros, seja com o intuito de facilitar a comunicação ou de utilizar de outros serviços oferecidos pelos mesmos.

A ciência forense, por sua vez, encontra-se em pleno desenvolvimento no Brasil por constituir uma área multidisciplinar do conhecimento e necessita por vezes de equipamentos que, via de regra, são de elevado valor monetário e exigem pessoal qualificado e treinado.

Com o desenvolvimento da química quântica e também das áreas ligadas à informática e aprimoramento dos equipamentos ópticos utilizados, atualmente a química computacional permite determinar a viabilidade de uma reação através do ponto de vista termodinâmico, utilizando simulações de dinâmica molecular, assim como é possível relacionar propriedades moleculares e estruturais, calculadas por métodos quânticos, à atividade biológica de diversos compostos, visando estimar a atividade biológica de novos compostos (FERREIRA, 2015).

De acordo com seus desenvolvedores, o aplicativo *PhotoMetrix®* utiliza a câmera do *Smartphone* para adquirir imagens que são analisadas e decompostas por pontuações e carregamentos, sendo possível realizar uma análise univariada pelo método de regressão linear simples com variáveis separadas dos sistemas de cores RGB (do inglês *red, green and blue*), HSV (baseado em propriedades da cor em nível de interface com o usuário, seu acrônimo é formado pelas iniciais das palavras *Hue, Saturation and Value*) e HLS (também baseado em parâmetros mais intuitivos para a descrição da cor, seu acrônimo é formado pelas iniciais das palavras *Hue, Lighthness and Saturation*). A versão *pro* do aplicativo permite realizar também calibração multivariada por mínimos quadrados parciais (do inglês *Partial Least Squares* ou PLS) e análise exploratória usando dendograma de agrupamento hierárquico (do inglês *hierarchical clustering dendogram* ou HCA).

Desta forma, vislumbra-se agregar o aplicativo as análises quimiométricas já relatadas previamente na literatura, e, levando em consideração que a identificação de cocaína e *cannabis* já foi previamente reportada, tem-se como objetivo propor a identificação e quantificação de amostras de MDMA e LSD, através da colaboração com a Unidade Técnico-Científica da Polícia Federal da cidade de Pelotas-RS.

2. METODOLOGIA

Realizou-se uma revisão bibliográfica a fim de nortear etapas práticas posteriores, que serão desenvolvidas quando existirem condições favoráveis e adequadas de segurança sanitária para retorno às atividades presenciais em laboratório.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

De acordo com OLIVEIRA (2017), o aplicativo *Photometrix*® pode ser utilizado para a identificação de amostras de cocaína e quantificação de alguns adulterantes. No estudo realizado pela autora são descritos métodos adequados para a preparação de diferentes amostras de cocaína apreendidas pela Polícia Federal de Brasília-DF. Tal identificação e quantificação de adulterantes tem grande importância para mapear a origem e quais trajetórias são realizadas pela droga no seu processo de comercialização, trabalho que é desenvolvido pelo projeto Perfil Químico de Drogas (PeQui), realizado pela Polícia Federal.

Na ciência forense, existem dois tipos de métodos, os presuntivos e os confirmatórios. Os testes presuntivos (ou de orientação) são utilizados buscando uma verificação rápida, por vezes ainda no local de coleta da amostra, visando balizar quais procedimentos deverão ser tomados a seguir, sendo que os principais exemplos de testes presuntivos são as análises colorimétricas. Para confirmar a identidade sugerida pelo teste colorimétrico, deve-se empregar testes confirmatórios, que em sua maioria utilizam equipamentos específicos e necessitam de pessoal treinado para operação.

Cabe salientar que devido a pandemia de *Coronavirus Disease 2019* (COVID-19), todas etapas previstas no cronograma inicial do projeto foram seriamente afetadas, sendo que as atividades práticas ainda virão a ser desenvolvidas em momento oportuno.

Para realizar as análises colorimétricas nas amostras de MDMA e LSD, utilizar-se-á o teste de Marquis, cujo reagente é preparado pela adição lenta de 2mL de metanal 37% a 40mL de ácido sulfúrico concentrado em banho de gelo, sob agitação lenta. Deve ser mantido refrigerado. Para realizar uma análise com o reagente de Marquis, bastam apenas poucas gotas da substância em análise e gotas do reagente, colocadas sob suporte adequado. Dependendo da natureza da substância, diferentes cores poderão ser observadas, conforme imagem abaixo.

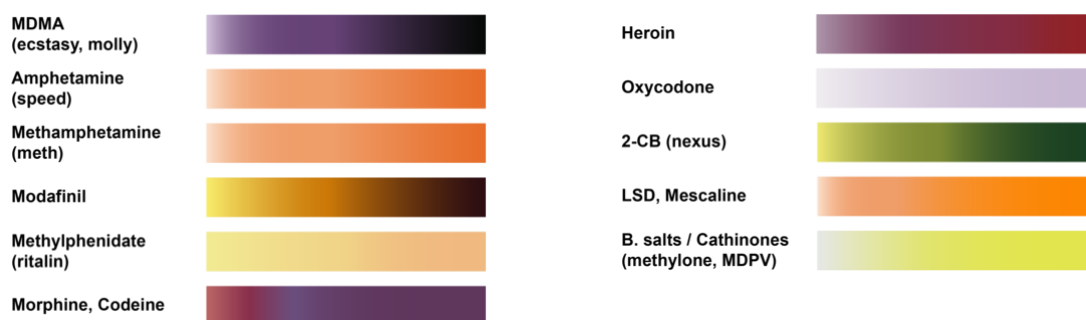


Figura 1: Cores obtidas no teste de Marquis para derivados de ópio, anfetaminas e outros alcalóides.

Após realizar-se o teste de Marquis para as amostras fornecidas pela Unidade Técnico-Científica da cidade de Pelotas-RS, as mesmas serão submetidas a análise multivariada no aplicativo *Photometrix*® e também a análises mais específicas, visando confirmar os resultados e validar a metodologia proposta.

Em um momento propício, quando do retorno das atividades presenciais em laboratório, pretende-se seguir o cronograma apresentado na tabela a seguir.

Atividade	Tempo estimado
Desenvolvimento de sistema de iluminação (caixa de papelão com as faces internas revestidas de papel manteiga).	Um dia.
Compra e montagem do sistema de iluminação (luminária de mesa articulável com lâmpada de LED branca marca Intral (100a240V-50/60Hz-15W; FP0,7/1320lm/6500K) posicionada acima da caixa.	Um dia.
Preparo das soluções reagentes.	Uma semana.
Preparo das amostras de LSD e MDMA.	A definir de acordo com a disponibilidade da Unidade Técnico-Científica da Polícia Federal de Pelotas.
Realização do teste de Marquis nas amostras.	Uma semana.
Obtenção das imagens no aplicativo <i>Photometrix®</i>	Em paralelo com a etapa anterior.
Obtenção e estudo dos resultados obtidos no aplicativo <i>Photometrix®</i>	Duas semanas
Realização de análise multivariada das características das imagens das amostras no <i>software Photoshop®</i>	Duas semanas.
Realização de testes confirmatórios nas amostras.	Um mês.
Estudo dos resultados dos testes confirmatórios e confronto com os testes preliminares	Duas semanas.
Compilação dos resultados	Três semanas.

Tabela 1: Cronograma das atividades a serem realizadas no retorno às atividades presenciais.

4. CONCLUSÕES

Percebe-se diante do exposto o quanto o emprego da tecnologia é benéfico para as ciências forenses. Pretende-se validar a metodologia proposta, pois sabendo-se que os *smartphones* são ferramentas bastante acessíveis, de fácil transporte e manuseio, seu uso em locais de crime pode ocorrer *in loco*, o que torna mais prático o dia-a-dia dos peritos.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

FERREIRA, M.M.C. **Quimiometria: conceitos, métodos e aplicações.** Campinas: Editora da Unicamp, 2016. 599 p.

OLIVEIRA, P.A.C. **Medidas colorimétricas com smartphones para identificação de amostras de cocaína e quantificação de alguns adulterantes.** 2017. 55f. Dissertação (Mestrado em Química) – Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade de Brasília.

FGV EAESP. Escola de Administração de Empresas de São Paulo da Fundação Getúlio Vargas. **Pesquisa Anual do Uso de TI.** São Paulo, maio 2021. Acessado em: 03/02/2021. Online. Disponível em: <https://eaesp.fgv.br/producao-intelectual/pesquisa-anual-uso-ti>. Acesso em 03/02/2021.

REVISTA ANALYTICA. **A química analítica e a ciência forense.** Revista Analytica Digital. Acessado em 12/12/2020. Disponível em: <https://revistaanalytica.com.br/a-quimica-analitica-e-a-ciencia-forense>

SCIENTIFIC WORKING GROUP FOR THE ANALYSIS OF SEIZED DRUGS (SWGDRUG). **RECOMMENDATIONS**, 2016. Acessado em: 05/11/2020. Disponível em: www.swgdrug.org/Documents/SWGDRUG%20Recommendations%20Version%2007-1.pdf