

APLICAÇÃO DE FERROCENIL CHALCONA COMO REVELADOR DE IMPRESSÕES DIGITAIS LATENTES

AMANDA FONSECA LEITZKE¹; DANIELLE TAPIA BUENO²; BRUNA CAETANO MOREIRA²; LEONOR HURTADO IRIBARREM²; NATÁLIA LEITE GOULART²; CLAUDIO MARTIN PEREIRA DE PEREIRA³

¹Universidade Federal de Pelotas – INCT Forense – (amandafonsecaleitzke@gmail.com)

²Universidade Federal de Pelotas – INCT Forense – (lahbbioufpel@gmail.com)

³Universidade Federal de Pelotas – INCT Forense – (claudiochemistry@gmail.com)

1. INTRODUÇÃO

A identificação de impressões digitais é uma das mais importantes formas de investigação criminal devido ao fato de cada ser humano possuir um conjunto único, que o acompanham desde a gestação até sua morte sem apresentar mudanças significativas (BALSAN et al., 2019). As impressões digitais latentes (IDLs) não são visíveis a olho nu, necessitando de tratamento para se tornarem visíveis. Esse tratamento é denominado de “revelação de impressão digital latente”, no qual é necessário utilizar processos físicos ou químicos, os quais ao interagir com as secreções da pele faz com que a impressão digital latente apresente contraste (NICOLODI et al., 2019).

Chalconas e seus derivados são substâncias de grande interesse químico-farmacológico e tem recebido uma grande atenção devido a sua estrutura relativamente simples e a diversidade de atividades farmacológicas que apresentam (FERREIRA et al., 2018). Além disso, recentes estudos de nosso grupo de pesquisa relatam a utilização das chalconas como pós reveladores de IDLs. O interesse da aplicação nessa área está relacionado a sua síntese que utiliza protocolos sintéticos orgânicos convencionais, assim favorecendo o processo de síntese da química limpa e atende aos requisitos de qualidade de revelação de uma impressão digital (BALSAN et al., 2019). A síntese da chalcona produz um pó branco, o qual limita a sua utilização apenas para revelação de impressões digitais em superfícies escuras, não apresentando bons resultados em superfícies claras. Desta forma, se faz necessário conjugar a chalcona com compostos coloridos. Nesse sentido, o grupamento ferroceno exibe propriedades químicas interessantes e ao ser inserido em estruturas orgânicas pode produzir derivados com importantes aplicações, além de apresentar baixo custo (PEREIRA et al., 2013).

O ferroceno é uma substância organometálica que possui capacidade de absorver radiação. Com isso, um cromóforo de ferroceno confere uma coloração que varia de amarelo-alaranjado a azul-esverdeado e esses produtos são firmemente fixados em vários materiais (PEREIRA et al., 2013). Sendo assim se faz interessante a síntese de uma ferrocenil chalcona que é quando um dos anéis aromáticos da chalcona é substituído por um grupo ferrocenil (ATTAR et al., 2011). Nesse contexto, o objetivo do presente trabalho foi sintetizar uma molécula derivada da chalcona substituída com o composto acetilferroceno, bem como a sua caracterização utilizando espectroscopia de infravermelho com transformada de Fourier (FTIR) e por Espectroscopia na região do Ultravioleta-visível (UV-Vis) a fim de avaliar este como um novo revelador de IDLs.

2. METODOLOGIA

Conforme metodologia de ALBAYRAK et al. (2021), para realizar a síntese da ferrocenil chalcona foram realizados os seguintes passos: Em um balão de 50 mL foi dissolvido 0,5 g; 2,19 mmol de acetilferroceno e 0,147 g; 2,63 mmol de hidróxido de potássio em 13 mL de etanol em agitação constante por 15 minutos. Posteriormente, dissolveu-se 0,214 g; 2,19 mmol de p-metoxibenzaldeído em 13 mL de etanol e adicionou-se gota a gota à solução, após foi mantido em refluxo por 2 horas. Por fim, foi hidrolisado com 15 mL de solução saturada de cloreto de amônio e com o auxílio de um funil de separação foi extraído com 25 mL de diclorometano.

A análise espectroscópica na região do ultravioleta/visível (UV-Vis) foi realizada em um equipamento Shimadzu (UV-2550 UV-Vis), em uma concentração de 500 ppm em diclorometano, com varredura no intervalo de 200 à 600 nm. Para os espectros na região do Infravermelho foi empregado um espectrofotômetro de modelo SPIRIT da SHIMADZU, sendo a ferrocenil chalcona misturada com brometo de potássio (concentração 0,5%) e realizadas leituras de 4000 a 400 cm^{-1} , 45 varreduras e resolução de 4 cm^{-1} .

Para a revelação das IDLs, foram testadas as impressões digitais naturais e sebáceas, depositadas em superfície de vidro e plástico, aplicando uma pressão média de 3 a 5 segundos. Para obter a impressão digital natural, as mãos do doador foram lavadas previamente com sabão neutro e depositadas após 30 minutos. Para obter o conteúdo sebáceo, friccionou-se os dedos sobre as partes oleosas do rosto e em seguida realizou-se a deposição (SEARS et.al., 2012). A revelação foi feita 24 horas após a deposição com a ferrocenil chalcona sintetizada, utilizando-se pincéis específicos para esta finalidade. Por fim, as impressões digitais reveladas foram fotografadas com a câmera semiprofissional Canon EOS Rebel T6 na sala de papiloscopia do Laboratório de Lipidômica e Bioorgânica (LLipBio).

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Conforme as metodologias supracitadas, a *ferrocenil chalcona* foi obtida. É possível observar na **Figura 1** os resultados obtidos por UV-Vis e FTIR para fins de caracterização da ferrocenil chalcona. De acordo com o reportado por WIJAYANTI et al. (2021), derivados de chalconas absorvem luz na região UV-vis. O espectro UV-vis das chalconas consiste em duas bandas essenciais de absorção, ou seja, banda I e II como bandas principais e secundárias, respectivamente. A banda I de chalconas geralmente aparece em 220-270 nm, enquanto a banda II aparece em 340-390 nm. Conforme a **Figura 1A**, a análise de UV-Vis aplicada para caracterização da ferrocenil chalcona indicou dois picos de absorção, um primário em torno de 255 nm e outro secundário em torno de 347 nm. Ainda no espectro de UV-Vis é possível observar um pico largo em torno de 450-514 nm que pode ser atribuído à transição d-d do ferro da porção ferrocenil da molécula (PRASATH et al., 2013).

O espectro de absorção na região do infravermelho da ferrocenil chalcona está apresentada na **Figura 1B**. É possível observar estiramentos do grupo carbonila C=O na região de 1655 cm^{-1} , em 1600 cm^{-1} observa-se um estiramento decorrente da ligação C=C e em 1508 cm^{-1} um estiramento decorrente da ligação dupla entre carbonos (C=C) do anel aromático. Os picos em 1096, 1041 e 831 cm^{-1} são decorrentes da vibração do ciclopentadieno fora do plano e o pico de 496 cm^{-1} está associado a vibração do anel metálico assimétrico, o qual é característico de moléculas de ferroceno. Em suma, os resultados obtidos correspondem com as bandas

características de FTIR da ferrocenil chalcona reportado por DOGAN et al. (2004) e por RADHAKRISHNAN et al. (2007).

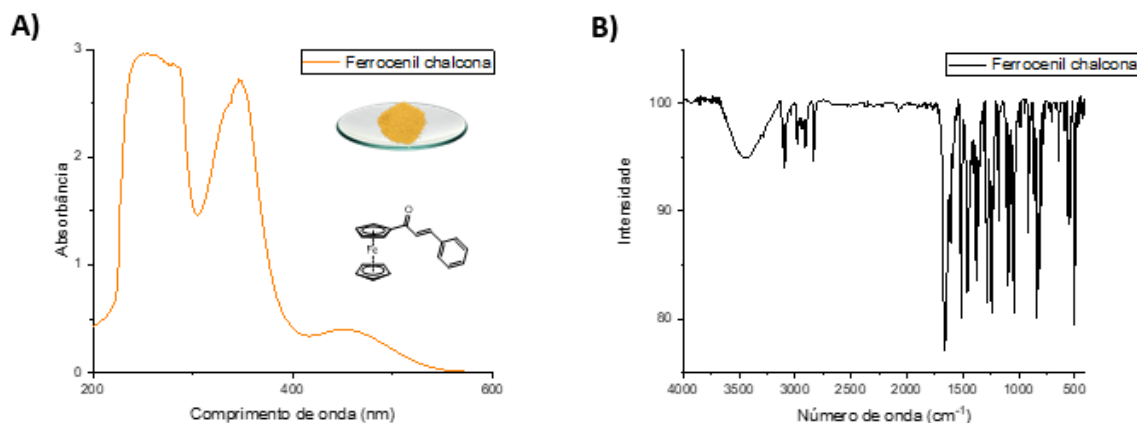


Figura 1. (A) Espectro de UV-vis, (B) Espectro de FTIR da ferrocenil chalcona.

Na análise das revelações das IDLs (**Figura 2**), é possível observar algumas minúcias presentes nessas impressões digitais com o Sistema Vucetich de Classificação de Impressões Digitais como verticilo, bifurcação, ilha e cruzamento, além de também ser possível constatar que a interação física do pó ocorreu de forma igualitária entre as impressões digitais naturais e sebáceas. Em relação a superfície, pode-se observar que o pó interagiu melhor com a superfície de vidro quando comparado com a superfície plástica, tendo em vista que as IDLs apresentaram um contraste maior na mesma, essas observações ocorreram em decorrência das interações intermoleculares.

Sendo assim a aplicação da ferrocenil chalcona se mostrou eficiente para a revelação das IDLs, tanto para revelações de impressões digitais naturais quanto sebáceas. Nesse sentido, para avaliar a qualidade das impressões digitais reveladas, foi empregada a escala desenvolvida por SEARS et al. (2012), na qual a ferrocenil chalcona apresentou nível de detalhamento 4, em que a revelação é considerada muito boa, com todos detalhes de crista papilar visível e impressão digital identificável. Além disso, a combinação do ferroceno com a chalcona gerou um produto de cor laranja que poderá ser utilizado em superfícies claras e escuras, proporcionando um contraste especial.

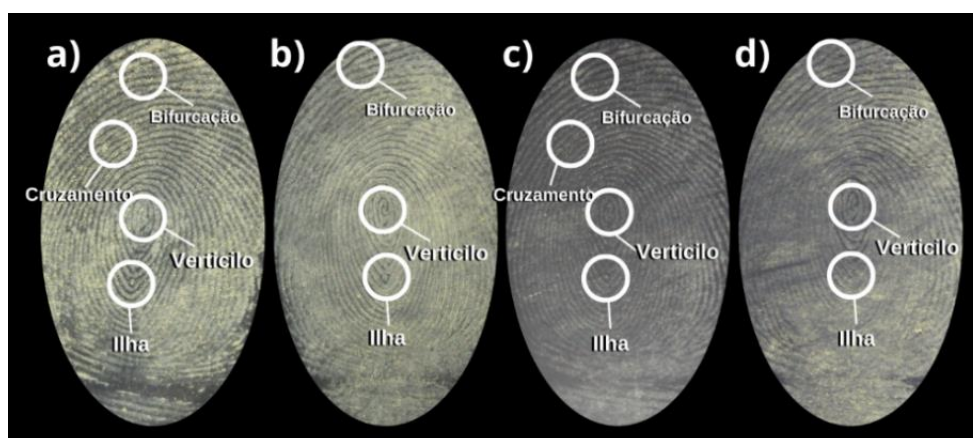


Figura 2. Impressão digital (a) natural dedo esquerdo e (b) sebácea dedo direito em superfície de vidro e (c) natural dedo esquerdo e (d) sebácea dedo direito em superfície de plástico revelada com a ferrocenil chalcona após o tempo de envelhecimento de 24h, conforme metodologia de SEARS et al. (2012).

4. CONCLUSÕES

A partir dos resultados apresentados, é possível concluir que a ferrocenil chalcona é um bom revelador com nota de nível de detalhamento 4, a qual é o valor máximo conforme metodologias supracitadas, pois foi possível observar um contraste significativo em superfície de vidro e plástico, além de apresentar igual aderência em impressões digitais sebáceas e naturais, permitindo uma análise clara das minúcias das IDLs. Desta forma, há possibilidade de otimização do material desenvolvido para futura aplicação como produto voltado para área forense e Segurança Pública. Além disso, serão realizados procedimentos em larga escala e análises como Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de Hidrogênio (^1H) e Carbono-13 (^{13}C), Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) e Raio X estão em curso a fim de elucidar a capacidade de revelação do pó e a sua interação com diferentes superfícies.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALBAYRAK, E.; IŞILAR, Ö.; BIYIKOĞLU, M.; YAĞLIOĞLU, A. Ş.; BULUT, A. The Synthesis and Anti-cancer Activities of Ferrocenyl Chalcones; Drug-Likeness Calculations. **International Journal of Engineering Research and Development**, v.13, n.2, p. 690-703, 2021.
- ATTAR, S.; O'BRIEN, Z.; ALHADDAD, H.; GOLDEN, M. L.; CALDERÓN-URREA, A. Ferrocenyl chalcones versus organic chalcones: a comparative study of their nematocidal activity. **Bioorganic & medicinal chemistry**, v. 19, n. 6, p. 2055-2073, 2011.
- BALSAN, J. D.; ROSA, B. N.; PEREIRA, C. M.; SANTOS, C. M. Desenvolvimento de metodologia de revelação de impressão digital latente com chalconas. **Química Nova**, v. 42, n.8, p. 845-850, 2019.
- DOĞAN, Ö., ŞENOL, V., ZEYTINCI, S., KOYUNCU, H., & BULUT, A. Efficient synthesis of ferrocenylenones by Friedel–Crafts acylation with $\text{EtAlCl}_2\text{--Me}_3\text{Al}$. **Journal of organometallic chemistry**, v. 690, n. 2, p. 430-434, 2005.
- FERREIRA, M. K. A.; FONTENELLE, R. O. D. S.; MAGALHÃES, F. E. A.; BANDEIRA, P. N.; DE MENEZESE, J. E. S. A.; DOS SANTOS, H. S. Potencial farmacológico de chalconas: uma breve revisão. **Revista Virtual de Química**, v. 10, n. 5, p. 1455-1473, 2018.
- NICOLODI, C.; ROSA, B. N. da.; SILVA, C. C. da.; BERNEIRA, L. M.; PACHECO, B. S. POLETTI, T.; VENZKE, D.; MARIOTTI, K. C.; PEREIRA, C. M. P. Aplicação De Condimentos Na Revelação De Impressões Digitais Latentes: Um Experimento No Ensino de Química. **Química Nova**, v. 42, p. 962-970, 2019.
- PRASATH, R.; BHAVANA, P.; NG, S. W.; TIEKINK, E. R. T. The facile and efficient ultrasound-assisted synthesis of new quinoline-appended ferrocenyl chalcones and their properties. **Journal of Organometallic Chemistry**, v.726, p. 62-70, 2013.
- PEREIRA, C. M. P.; VENZKE, D.; TROSSINI, G. H. G. Síntese de heterociclos bioativos derivados do ferroceno. **Química Nova**, v. 36, n.1, p.143-152, 2013.
- RADHAKRISHNAN, S.; PAUL, Santhosh. Conducting polypyrrole modified with ferrocene for applications in carbon monoxide sensors. **Sensors and Actuators B: Chemical**, v. 125, n. 1, p. 60-65, 2007.
- SEARS, V. G.; BLEAY, S. M.; BANDEY, H. L.; BOWMAN, V. J. A methodology for finger mark research. **Science & Justice**, v. 52, n.3, p.145-160, 2012.
- WIJAYANTI, L.W.; SWASONO, R.T.; LEE, W.; JUMINA, J. Synthesis and Evaluation of Chalcone Derivatives as Novel Sunscreen Agent. **Molecules**, v.26, n.9, p. 2698, 2021.