

Design de Experimentos (DoE) no desenvolvimento de método de Novas Substâncias Psicoativas

Gleicielle T. Wurzler¹ (PG), Ananda S. Antonio¹ (PG), Cecília A. Bhering¹ (PG), Francisco R. A. Neto¹ (PQ), Gabriela V. Costa^{1*} (PQ)

¹Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Núcleo de Análises Forenses (NAF), CEP 21941-598

* e-mail: gabrielavanini@iq.ufrj.br

Palavras Chave: NSP, DoE, anfetaminas, Novas Substâncias Psicoativas, design de drogas, CG-EM

Introdução

As Novas Substâncias Psicoativas (NSP) estão em constante desenvolvimento no mercado ilícito de drogas de abuso como uma forma de burlar a legislação internacional, suprimindo as demandas de consumo e substituindo parcialmente as drogas existentes. Visto as constantes modificações das drogas de abuso presente no mercado ilícito, os métodos analíticos aplicados a detecção destas também precisam estar em constante evolução. Esse trabalho tem como objetivo desenvolver um método analítico que possa ser executado de forma prática pelos peritos na identificação de drogas de abuso apreendidas no Estado do Rio de Janeiro (RJ). A cromatografia gasosa (CG-EM) é uma técnica comumente encontrada nos laboratórios periciais e, combinada com técnicas quimiométricas, representam um grande potencial na caracterização química e toxicológica de matrizes complexas. O método foi desenvolvido a partir da literatura^[1] para 8 substâncias abrangendo as categorias: fenetilaminas (anfetaminas, metanfetaminas, MDMA, 25I-NBOMe), canabinóides (THC, CBN) “clássicos” (cafeína) e lisergamina (LSD), sendo esses representantes das principais categorias de substâncias apreendidas nos últimos anos no RJ.

Resultados e Discussão

O método desenvolvido se baseou no de Meira *et al.* (2021), sendo realizadas pequenas modificações para aumentar a resolução cromatográfica das substâncias avaliadas. Resumidamente os parâmetros iniciais utilizados foram: coluna cromatográfica DB-5, volume de injeção de 1 µL sem divisão de fluxo; injetor a 280 °C; fluxo de gás a 1 mL min⁻¹; linha de transferência a 300 °C; 2 min de tempo de espera do solvente; faixa de varredura de *m/z* 35-500. O programa de temperatura iniciou com uma isoterma de 50 °C por 1 min; seguido de aquecimento até 130°C (10 °C min⁻¹); isoterma de 130 °C por 3 min; aquecimento até 280 °C (30 °C min⁻¹); aquecimento até 325 °C (20 °C min⁻¹). O cromatograma obtido com parâmetros ajustados encontra-se na Figura 1.

A partir deste ajuste preliminar, três parâmetros cromatográficos foram otimizados pelo método de

superfície de resposta por composto central (Tabela 1), utilizando como variável-resposta a área dos picos cromatográficos. Dentre os fatores avaliados, apenas as rampas de temperatura influenciaram significativamente os resultados. Foi plotada a superfície de resposta quadrática ($R^2 = 0,9564$), sendo encontrado como pontos ótimos para as rampas 1, 2 e isoterma 2 iguais a 18,4, 109,8 e 31,7, respectivamente. Essas novas condições serão utilizadas para prosseguir o trabalho com a etapa de validação do método.

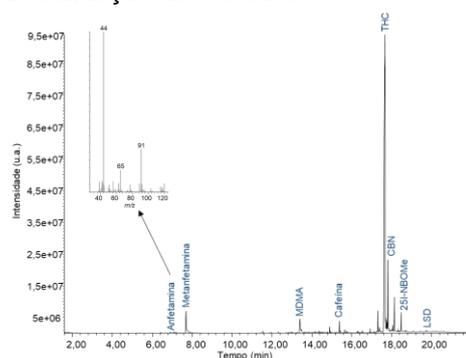


Figura 1. Cromatograma obtido a partir dos parâmetros ajustados.

Tabela 1. Fatores avaliados no experimento de Composto Central.

Fatores	Níveis				
	- α	-1	0	+1	+ α
Rampa 1	1,6	5,0	10,0	15,0	18,4
Isoterma 2	109,8	120,0	135,0	150,0	160,2
Rampa 2	14,9	20,0	27,5	35,0	40,1

Conclusões

O desenvolvimento e otimização do método cromatográfico permitiu melhorar a performance da análise, com redução da duração da corrida cromatográfica e resolução suficiente para detecção de 8 categorias distintas de NSP e drogas de abuso convencionais simultaneamente.

Agradecimentos

Agradecemos a FAPERJ e a PCERJ.

¹ Meira, V. L.; Oliveira, A. S.; Cohen, L. S. A.; Bhering, C. A.; Oliveira, K. M.; Siqueira, D. S.; Oliveira, M. A. M.; Aquino Neto, F. R. D. e Vanini, G. *Forensic Sci. Int.* **2021**, *318*, 110588.