



**ANÁLISES QUÍMICAS DE ÁGUAS SUPERFICIAIS DO LAGO AZUL,
PERTENCENTE À BACIA HIDROGRÁFICA DO RIO LONTRA, PARA GERAR
ESTIMATIVA DA CONCENTRAÇÃO DE COCAÍNA NA REGIÃO DA VIA LAGO
(ARAGUAÍNA-TO)**

FIGUEIRA, Ana Rita da Conceição¹; ALCÂNTARA, Daniel Barbosa²

RESUMO

O consumo de drogas ilícitas causa inúmeros problemas tanto para o indivíduo que consome, quanto para a sociedade. Nesta perspectiva, o presente estudo visa desenvolver e validar uma metodologia para quantificar cocaína em águas residuais/superficiais, em que foca na utilização de amostras do lago azul, que pertence à bacia hidrográfica do Rio Lontra, em Araguaína-TO. A pesquisa foi desenvolvida em duas partes: uma revisão bibliográfica, onde foram analisados 40 artigos sobre substâncias ilícitas em águas residuais/superficiais, e a parte laboratorial realizada no laboratório de cromatografia gasosa (LabCrom) da Universidade Federal do Norte do Tocantins (UFNT). Na qual, a metodologia empregou cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM) e utilizou padrões de cocaína e benzoilecgonina em diferentes concentrações para análise. Além disso, foi analisado o efeito matriz (EM), o qual indicou uma interferência negativa, entretanto pode ser corrigida com a utilização de curvas específicas da matriz, ou seja, com ajustes adequados na metodologia. Além disso, a pesquisa demonstrou a eficácia do método desenvolvido para a quantificação da cocaína.

Palavras-chave: Cocaína, Epidemiologia baseada no esgoto, Drogas.

¹ Bolsista do Programa de Iniciação Científica (PIBIC/PIBITI). Universidade Federal do Norte do Tocantins (UFNT), Centro de Ciências Integradas. e-mail: ana.figueira@ufnt.edu.br

² Professor do Magistério Superior. Universidade Federal do Norte do Tocantins (UFNT), Centro de Ciências Integradas. e-mail: daniel.alcantara@ufnt.edu.br



I. INTRODUÇÃO/JUSTIFICATIVA

O presente trabalho aborda o consumo de substâncias psicoativas (drogas de abuso), tendo como foco principal a análise de cocaína em águas residuais/superficiais, logo que o consumo destas substâncias tem se tornado motivo de grande preocupação, pois gera malefícios para a população e exige alocação de recursos extraordinários (REx) por partes dos órgãos públicos (De Assis Trindade; Diniz e Sá-Júnior, 2018).

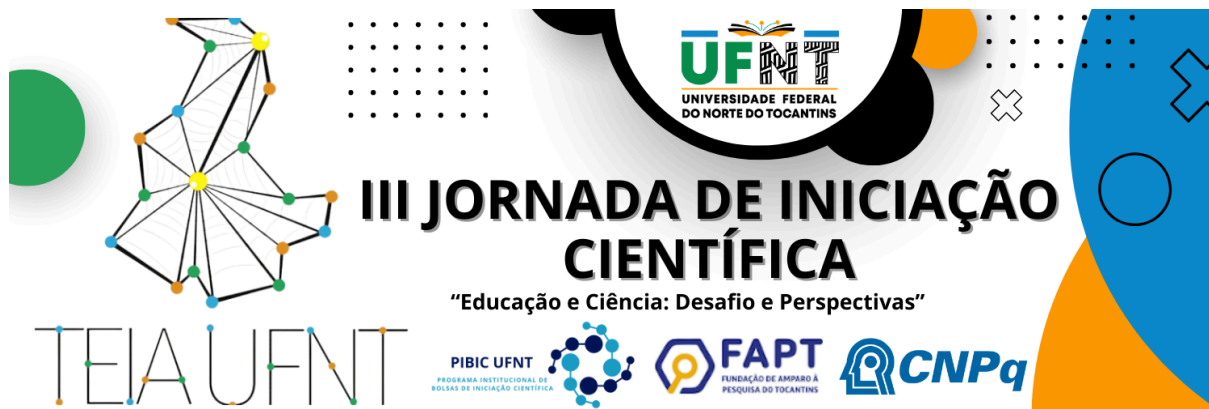
Segundo estudos recentes, o consumo de drogas de abuso, como por exemplo a cocaína, é uma preocupação crescente, desse modo exige estratégias de controle e monitoramento, “A complexidade e a magnitude do problema contemporâneo do consumo de drogas no Brasil têm sido discutidas por diferentes setores da sociedade civil e do Estado, (Brasil, 2003)”.

Diante disto, para estimar o consumo de drogas em uma determinada população, entre várias maneiras tem-se a técnica de Epidemiologia Baseada em Esgoto (EBE), no qual foi escolhida nesta pesquisa, logo que complementa dados obtidos por métodos tradicionais, a título de exemplo apreensões, questionários e hospitalizações (UNODC, 2019). Desta maneira, a aplicação prática desta pesquisa, está relacionado na possibilidade de identificar padrões de consumo de drogas e conseqüentemente gerar informações para a formulação de políticas públicas de prevenção e controle.

A vista disso, é de suma importância ressaltar que as atividades desenvolvidas nesta pesquisa são de grande valia para que ocorra o aprimoramento da análise de substâncias ilícitas em águas residuais/superficiais. Dessa forma, é essencial destacar que o método escolhido para analisar as substâncias (drogas de abuso) foi o método QuEChERS. O método foi originalmente desenvolvido para a determinação de pesticidas em alimentos usando técnicas cromatográficas 2 (Guimarães, 2023), contudo ao longo dos anos vem sendo adaptado para determinação de outros contaminantes orgânicos em diferentes matrizes ambientais.

Neste contexto, vêm sendo desenvolvidos estudos que envolvem o método, como o de Brondi et al, (2013) que desenvolveu e validou métodos analíticos para a determinação de resíduos de medicamentos veterinários em leite e carne de búfala.

Desta maneira, ao trabalhar com este tópico (análises química do consumo de drogas de abuso em águas residuais), observa-se que o tema fortalece a formação



de profissionais na área de química analítica, logo que capacita-os tanto para atuar na área de controle de qualidade da água e toxicologia. Diante disso, o público-alvo desta pesquisa são professores, graduandos e pós-graduandos em química e áreas relacionadas.

A motivação para o desenvolvimento da presente pesquisa foi tanto para a validação do método QuEChERS por CG-EM, no qual é relativamente novo para a análise de drogas de abusos em águas residuais, quanto para fornecer ferramentas para o enfrentamento de questões ambientais e sociais relacionadas ao consumo de drogas e conseqüentemente reforçando a inseparabilidade entre ensino, pesquisa e extensão, logo que os resultados produzidos podem impactar diretamente a comunidade, isto é por meio da divulgação científica ou da aplicação prática dos métodos desenvolvidos.

II. OBJETIVOS

Objetivo Geral: Desenvolver e validar uma metodologia para quantificar cocaína em águas superficiais, com foco em sua aplicação na bacia hidrográfica do Rio Lontra, em Araguaína-TO.

Objetivos Específicos:

- Realizar uma revisão bibliográfica sobre a análise química de drogas de abuso em águas residuais.
- Desenvolver e validar uma metodologia utilizando o QuEChERS-CG/EM.
- Participar de eventos científicos e promover a disseminação dos resultados.
- Gerar produções científicas na forma de artigos.

III. METODOLOGIA

A pesquisa foi dividida em duas partes: a primeira consistiu em uma revisão bibliográfica qualitativa, no qual foi baseada na análise de artigos das plataformas SciSpace e ScienceDirect. Sendo assim, foram examinados cerca de 70 artigos de vários países, como Brasil, China e Estados Unidos, porém apenas 40 foram selecionados para integrar a base de dados, pois os demais não atenderam aos objetivos da pesquisa, no qual se tratava de análise de substâncias ilícitas em águas residuais, principalmente a cocaína e maconha. Já a segunda parte, foi realizada



uma experimentação nas dependências do laboratório de cromatografia (LabCrom) do curso do colegiado de Química Licenciatura na Universidade Federal do Norte do Tocantins (UFNT), no qual realizou análises por meio do equipamento CG-EM/Agilent Technologies (modelo 7890B do CG e 5977B do EM). Utilizando o gás de arraste hélio (99,99%) na vazão de $1,2 \text{ mL min}^{-1}$.

Nesta perspectiva, é importante ressaltar que as amostras utilizadas para injetar no equipamento (CG-EM) foram preparadas com padrões analíticos comerciais de cocaína e benzoilecgonina obtidos pela Sigma Aldric (pureza > 90 %) ambos na concentração de $100 \mu\text{g mL}^{-1}$, no qual foram diluídas para concentrações finais de 300, 500, 800, 1000, 1300 e $1500 \mu\text{g L}^{-1}$.

Além disto, foi utilizado o método de preparo de amostra QuEChERS, em que refere-se a um método baseado em extração, seguido de partição líquido-líquido, somada a uma fase de limpeza por extração em fase sólida dispersiva, (González-Curbelo et al., 2015). Neste contexto, obteve-se o extrato a partir da extração (QuEChERS adaptado), de amostras coletadas no Lago Azul, próximo a via lago e posteriormente realizou-se a injeção das amostras no CG-EM.

IV. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a avaliação dos artigos científicos selecionados, foi realizada uma amostragem, no qual permitiu a elaboração de uma tabela que resume informações contidas nos artigos, por exemplo: Analito analisado, faixa de concentração (ng/L) e método de detecção. Desse modo, com as informações contidas na tabela, possibilitou a criação de um conjunto de gráficos que sintetizam os dados relevantes de cada artigo.

Exemplificando, ao comparar as drogas de abuso e seus metabólitos, juntamente com a quantidade que foram citados nos artigos, demonstrando quais foram os mais investigados com o passar dos anos, especificamente entre os anos de 2015 a 2023. Consta-se que entre os anos de 2018 e 2022, ocorreram mais pesquisas relacionadas às análises de drogas em águas residuais.

Nesta perspectiva, ao comparar as concentrações obtidas dos analitos, é possível constatar, que o THC-COOH e a benzoilecgonina, metabólitos da maconha e cocaína respectivamente, são os encontrados em maiores concentrações (ng/L). A vista disso, a cocaína é uma das drogas estimulantes mais consumida a nível



Europeu tendo como usuários aproximadamente 14.1 milhões de adultos (EMCDDA, 2014b).

Posterior a realização da revisão bibliográfica, procedeu-se com as análises cromatográficas no CG-EM, em que utilizou a cocaína deuterada (COC-d3) como padrão interno logo que, de acordo com Chasin et al. (1994), para detecções fragmentográficas de massas, o mais correto é que se use um padrão interno análogo à molécula do analito pesquisado. Desta maneira, de acordo com as análises obteve os cromatogramas.

O primeiro cromatograma é resultado de uma adaptação do método de Alves (2010), no qual utilizou um padrão puro de cocaína ($10 \mu\text{g L}^{-1}$) no método Scan, método este que permite a detecção de todos os íons fragmentados presentes na solução da cocaína, deste modo, após a análise do cromatograma é possível observar o elevado tempo da corrida cromatográfica.

Após a análise do cromatograma, foi possível constatar que seria necessário a utilização do método Selected Ion Monitoring (SIM), pois aumenta consideravelmente a sensibilidade da análise. Desse modo, possibilitou observar que o tempo de retenção (TR) da cocaína poderia ser menor neste método, logo que ao analisar a relação do TR com a rampa de temperatura, notou-se que com o aumento da temperatura o tempo de retenção foi menor, pois o aumento da temperatura fez que com que o analito se volatiliza-se mais rápido, permitindo otimizar a separação dos compostos ao longo da análise, garantindo uma eluição eficiente.

Além disso, foi possível analisar os dados e construir a curva de calibração, para o analito com as 6 concentrações diferentes: $300 \mu\text{g L}^{-1}$, $500 \mu\text{g L}^{-1}$, $800 \mu\text{g L}^{-1}$, $1000 \mu\text{g L}^{-1}$, $1300 \mu\text{g L}^{-1}$, $1500 \mu\text{g L}^{-1}$. Em que o R^2 , coeficiente de determinação teve um resultado próximo a 1, indicando um bom ajuste de correlação entre os eixos. Posteriormente, após os resultados das análises realizadas em triplicatas, foi possível estimar o coeficiente de variação (CV), que variou de 0,5 a 2%, desta maneira indica que os dados obtidos são consistentes e precisos em relação à média.

Houve posteriormente a avaliação do efeito matriz (EM), no qual se refere a um resultado da interferência dos coextrativos da amostra, que impactam a precisão e exatidão dos resultados da análise (Picó; Blasco; Font, 2003; Pinho et al., 2009). Diante disso, foi realizado o EM comparando os coeficientes angulares da curva de



calibração no solvente e na matriz. É importante ressaltar que para não considerar a presença de EM, os valores devem estar entre -20% e 20%. Fora desse intervalo, conclui-se que há efeito matriz, e a curva da matriz deve ser usada para análises quantitativas, conforme Alcântara et al. (2018).

Desta maneira, a curva no solvente apresentou $R^2 = 0,9998$ e a curva na matriz $R^2 = 0,9833$, com equações lineares $y=2546,3x-581202$ para o solvente e $y=1165x-284750$ para a matriz. Além disso, após o cálculo, obteve o efeito matriz (EM) de -54,25 %. Com o resultado do EM negativo, nota-se que os componentes da amostra diminuí a detecção do composto analisado, as influências no EM são causadas por fatores que podem afetar diretamente os resultados, a título de exemplo as propriedades físico-química do analito e a natureza da própria amostra, (Schenck; Lehotay, 2000). Entretanto, apesar de um EM negativo representar um desafio para a quantificação, esse valor pode ser considerado aceitável se a curva na matriz for utilizada para correções.

V. CONCLUSÃO/CONSIDERAÇÕES FINAIS

Portanto, conclui-se que a pesquisa atingiu seu objetivo, logo que validou um método eficaz para quantificar cocaína em águas residuais/superficiais, com precisão. Desta maneira a utilização do método QuEChERS-CG-EM se mostra promissor na detecção de drogas em diferentes contextos. Além disso, o uso de técnicas cromatográficas e a correção do efeito matriz garantiram a precisão e confiabilidade dos resultados, sendo promissor para futuras análises ambientais e de monitoramento de drogas em águas.

VI. REFERÊNCIAS

- DE ASSIS TRINDADE, Bianca Pereira; DINIZ, Alessandra Vieira; SÁ-JÚNIOR, Antonio Reis. Uso de drogas entre estudantes universitários: uma perspectiva nacional. **Revista de Medicina e Saúde de Brasília**, v. 7, n. 1, 2018.
- BRASIL. Ministério da Saúde. Secretaria Executiva. Secretaria de Atenção à Saúde. Coordenação Nacional DST/Aids. A política do Ministério da Saúde para atenção integral a usuários de álcool e outras drogas. Brasília, 2003
- GUIMARÃES, Luis Felipe Lima. **DESENVOLVIMENTO E VALIDAÇÃO DE MÉTODO PARA DETERMINAÇÃO DE AMETRYN EM AMOSTRAS DE ÁGUAS POR QuEChERS-CG-EM E POSTERIOR APLICAÇÃO EM AMOSTRAS REAIS**. 2023. 77 f. TCC (Graduação) - Curso de Química, Universidade Federal Do Tocantins, Araguaína, 2023.



- BRONDI, Sílvia HG et al. **Desenvolvimento e validação do método QuEChERS na determinação de resíduos de medicamentos veterinários em leite e carne de búfalo.** Química Nova, v. 36, p. 153-158, 2013.
- GONZÁLEZ-CURBELO, M. Á. et al. Evolution and applications of the QuEChERS method. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**, v. 71, p. 169-185, 2015.
- CHASIN, A.A.M.; CHASIN, M.; SALVADOR, M.C. **Validação de métodos cromatográficos em análises toxicológicas.** Rev Farm Bioquim Univ S Paulo, v. 30, n. 2, p. 49-53, jul-dez, 1994.
- ALVES, Marcela Nogueira Rabelo. **Desenvolvimento e validação de metodologia para análise de cocaína, derivados e metabólitos em amostras de meconio utilizando a Cromatografia em fase Gasosa acoplada à Espectrometria de Massas.** 2010. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.
- PICÓ, Y. ; BLASCO, C.; FONT, G. **Environmental and food applications of LC-espectrometria de massas tandem em análise de resíduos de pesticidas: uma visão geral.** Mass Spectrom Rev, v.23, p. 45-85, 2003.
- ALCÂNTARA, D. B. et al. **Organophosphorus pesticide in sapodilla (manilkara zapota) fruit.** Article, v. 29, n. 10, p. 2180-2188, 2019. DOI: 10.21577/0103-5053.20180094.
- SCHENCK, F. J.; LEHOTAY, S. J. **Does further clean-up reduce matrix enhancement effect in gas chromatography analysis of pesticide residue in food?** J. Chromatogr A., v. 868, p. 51-61, 2000. DOI: 10.1016/S0021-9673(99)01137-1

VII. AGRADECIMENTOS

Agradeço o apoio e auxílio durante o período de realização da presente pesquisa da Fundação de amparo à pesquisa do Tocantins (FAPT), Universidade Federal do Norte do Tocantins (UFNT) e a coordenação do laboratório de Cromatografia Gasosa (LabCrom).