

TRATAMENTO QUIMIOMÉTRICO DE DADOS ESPECTRAIS DE ATR-FTIR PARA A DETECÇÃO DE VENENOS EM CAFÉ PARA INVESTIGAÇÕES FORENSES

IX Reunião Anual de Iniciação Científica da UFRRJ (RAIC 2021/2022) e III Reunião Anual de Iniciação em Desenvolvimento Tecnológico e Inovação (RAIDTec 2021/2022) - UFRRJ, 0ª edição, de 15/05/2023 a 19/05/2023
ISBN dos Anais: 978-65-5465-041-0

SANTOS; Ana Julia Sebrão dos¹, SANTOS; Luana de Oliveira², JUNIOR; José Geraldo Rocha³

RESUMO

No Brasil, há diversos casos de envenenamentos criminosos envolvendo a ingestão de matrizes alimentícias envenenadas como o café, comumente empregado devido à coloração escura e ao sabor forte que mascaram o veneno.¹ Dentre os venenos utilizados estão os raticidas comerciais contendo brodifacoum e os comercializados em feiras urbanas, de composição desconhecida. Este trabalho propõe o uso da técnica de reflexão total atenuada no infravermelho com transformada de Fourier (ATR-FTIR) e quimiometria para a identificação destes venenos em amostras de café. Cinco marcas comerciais de café em pó puro e combinados com raticidas de cinco marcas diferentes (brodifacoum) e procedentes de cinco regiões diferentes (feiras urbanas) foram empregados. O teor do raticida nas amostras de café foi de 5 %m/v (para preparos líquidos) e de 5 %m/m (para preparos sólidos). Os espectros de ATR-FTIR das amostras foram submetidos à correção normal padrão de sinal (SNV), para corrigir efeitos aditivos e multiplicativos e remover as interferências de espalhamento e de tamanho de partículas sólidas.² Algoritmos de primeira e segunda derivada foram aplicados para ajustar as variações sistemáticas na linha de base utilizando o software ChemoStat®. Na análise das amostras sólidas, adicionalmente, os dados foram centrados na média. Na análise das componentes principais (PCA) se observou a formação de 3 grupos, correspondentes ao café puro, contaminado com raticidas de marcas comerciais e de feiras urbanas. Na PCA das amostras líquidas, empregou-se a região do espectro na faixa de 4.000 – 700 cm⁻¹, produzindo uma matriz de 83 amostras por 1.711 número de ondas (83x1.711). A PC1 e PC2 explicaram 84,66% da variação entre as amostras. A distinção entre os grupos foi promovida pela PC2 (11,02%), influenciada pela região do espectro de 4.000 – 3.550 cm⁻¹ e 1.789 – 1.400 cm⁻¹, característicos de grupamentos –OH e C-O de ésteres, éteres e ácidos carboxílicos e C-N de alifáticos.^{3,4} Na PCA das amostras sólidas foi empregada a região 4.000 – 403 cm⁻¹, produzindo uma matriz de 85 amostras por 1.865 número de ondas (85x1.865). A PC1 e PC2 explicaram 85,14% da variação entre as amostras. A distinção entre os grupos foi promovida pela PC1 (64,96%), influenciada pela região de 3.950 – 3.510 cm⁻¹ e 1.755 – 1.438 cm⁻¹, associadas aos grupamentos –OH e C=O/C=N de ésteres/amidas, respectivamente.³ A região de 592 – 403 cm⁻¹ demonstrou ser importante para o agrupamento das amostras sólidas. Os grupamentos identificados estão presentes nas estruturas químicas de substâncias típicas encontradas no café comercial, tal como cafeína e em raticidas, tais como brodifacoum e o benzoato de denatônio. Uma banda estreita observada em 1.680 – 1.580 cm⁻¹ é indicativa de diversos grupos funcionais, incluindo deformações angulares de N-H e –NH de aldicarbe⁵, um carbamato de uso agrícola de alta toxicidade de venda controlada. A metodologia se mostrou promissora para aplicações forenses na classificação das amostras contaminadas com raticidas. Contudo, no momento, recomenda-se o uso paralelo de técnicas analíticas alternativas para a identificação do princípio ativo dos venenos empregados, como as cromatográficas.

PALAVRAS-CHAVE: PCA, ATR-FTIR, raticida, café, forense

¹ UFRRJ, anajuhsebrao@ufrrj.br

² UFRRJ, luanadeoliveira.92@gmail.com

³ UFRRJ, geraldorocha@ufrrj.br

