

## **ESPECTROMETRIA DE MASSA ACOPLADA À CROMATOGRAFIA LÍQUIDA E GASOSA: SUA APLICAÇÃO NAS CIÊNCIAS FORENSES**

**Rafael Christofoli Cavalcanti**

Bacharel e licenciado em Ciências Biológicas pela Universidade de Brasília (UnB).  
Especialista em Ciências Forenses IFAR/LS  
E-mail: rafaelchristofolic@gmail.com

**Palavras-chave:** Ciências Forenses, Espectrometria de massa, Cromatografia Líquida e Cromatografia Gasosa.

### **INTRODUÇÃO**

Entre as técnicas analíticas usadas em ciências forenses, a espectrometria de massa (MS - Mass Spectrometry) é uma das mais sensível para se detectar substâncias presentes em uma amostra (MAURER, 1998). A partir da ionização de moléculas da amostra aplicada em um espectrômetro de massa, os íons se movimentam ao longo de um campo eletromagnético e são captados pelo detector. Valores de razão massa/carga ( $m/z$ ) são determinados para cada íon (PITT, 2009). Espectrômetros de massa podem ser acoplado a outros equipamentos, dependendo da substância a ser analisada para aumentar a precisão dos resultados (MAURER, 1992). A preferência em utilizar MS a outros métodos consiste em sua alta especificidade, precisão e habilidade de lidar com misturas complexas (PITT, 2009). Por volta de 1970, a cromatografia gasosa (GC – GasChromatography) foi acoplada diretamente a MS e se tornou um poderoso método de identificação de compostos apolares (MAURER, 1992). Cerca de 20 a 30 anos depois, MS foi conectada a cromatografia líquida (LC – LiquidChromatography). Hoje, MS, utilizada com GC (GC-MS) ou LC (LC-MS), é ferramenta indispensável na toxicologia forense e em testes de doping (MAURER, 2006). De acordo com Anannis, et al (2007), LC-MS tem alcançado os melhores resultados na identificação de drogas. Amostras apreendidas, como vestígios de crimes e drogas, podem ser analisadas para se determinar sua composição e origem. Por auxiliar na determinação da composição

de amostras complexas, MS pode ser usado em diversos casos determinando, por exemplo, se as amostras contêm substâncias lícitas ou não.

## **OBJETIVO**

Analisar como a espectrometria de massa pode ser útil na identificação de substâncias encontradas e apreendidas por policiais, além de exemplificar situações nas quais seu uso é recomendado.

## **METODOLOGIA**

Por se tratar de um trabalho de pesquisa descritiva, documental e de caráter retrospectivo, este será realizado por meio de consulta bibliográfica utilizando-se diferentes plataformas de pesquisa, como PubMed, Scielo. As ideias propostas pelos autores serão interpretadas e aplicadas no contexto de ciências forenses.

## **RESULTADOS E DISCUSSÃO**

A cromatografia líquida (LC) e cromatografia gasosa (GC) são utilizadas para a separação de misturas, onde os componentes inseridos no equipamento têm diferentes tempos de retenção e conseqüentemente são detectados em momentos distintos (PETERS, 2011). Após esta separação, a amostra pode ser analisada por MS que, detecta os íons e os compara com um banco de dados, através do qual se obtém a composição da amostra de interesse (YATES, et al. 2009). A técnica de LC-MS surgiu após as técnicas de GC-MS. Esta demora ocorreu devido à incompatibilidade entre as fontes de íons existentes e a LC. Esta incompatibilidade foi resolvida com o desenvolvimento da fonte de íons ESI (PITT, 2009). De acordo com Peters (2012), GC-MS não consegue analisar amostras não voláteis, hidrofílicas e termolábeis. Desta forma, LC-MS cobriu esta lacuna e se torna cada vez mais importante na análise quantitativa e qualitativa de distintos compostos entre estes, quetamina, norquetamina, opiáceos, cocaína e anfetamina, em tecidos humanos (ex: sangue e urina) (MARQUET, 2002). Peters (2011) mostra em seu trabalho que GC-MS e LC-MS usadas em análises biológicas podem indicar o momento da administração de uma droga. Drogas ou substâncias administradas no intervalo post-mortem, com o intuito de simular uma auto eliminação, se encontraram nos

tecidos em estado inalterado. Por outro lado, substâncias administradas na vítima ainda viva (as mais comuns são esteroides, opiáceos, anfetamina, cocaína e drogas beta-adrenérgicas), se encontram em sua maioria, nos estados metabolizados (PETERS, 2011). A diferenciação entre o tempo de intoxicação e a morte pode ser identificada relacionando a quantidade de metabolitos presentes na amostra, comparada com a quantidade da droga não metabolizada. GC-MS é, atualmente, referência na determinação de morfina, codeína, heroína e seus metabolitos em amostras biológicas (ALLWOOD et al, 2009). A identificação dessas substâncias tem esclarecido a causa de diversas mortes por intoxicação. Por outro lado, LC-MS é a mais indicada para a identificação de LSD na urina, devido à capacidade da droga ser irreversivelmente adsorvida na coluna gasosa. (MARQUET, 1999). Drogas sintetizadas em laboratório, como metilenodioximetanfetamina (MDMA), possuem diversas rotas de síntese. A utilização da LC-MS para a identificação dos diferentes isótopos presentes na amostra é essencial para o reconhecimento das rotas de síntese, assim como para as possíveis localidades geográficas onde as substâncias são encontradas (BENSON et al, 2006). Por outro lado, IFA et al (2009) mostra em seu trabalho que, em acidentes de trânsito, GC-MS e LC-MS podem ser aplicadas para indicar a quantidade de álcool presente no sangue do motorista e desta maneira tipificar o ato da infração. A quantidade de álcool encontrado está diretamente relacionado ao estado de embriaguez do motorista e por consequência a sua capacidade de reação e a possibilidades de evitar um acidente (IFA et al, 2009). Outro uso para a técnica LC-MS é também citado por MORELATO et al (2013), que propõe seu uso na identificação de tintas usadas em documentos e na análise das impressões digitais encontradas em locais de crime. A avaliação das tintas pode identificar a autenticidade do documento e as análises dos desenhos formados a partir das papilas digitais (impressões digitais) mostram um histórico de possíveis locais e substâncias com a qual o suspeito possa ter entrado em contato antes de chegar ao local do crime.

## **CONCLUSÃO**

De acordo com o art. 1º do código penal brasileiro, ninguém será culpado sem crime que o tipifique. Isto significa que, para condenar uma pessoa, é necessário ter provas de que o corpo delicto encontrado na cena de crime é ilícito e que há nexo causal entre o material e o

suspeito. Neste contexto, GC-MS e LC-MS é uma ferramenta importante, que pode auxiliar na identificação de diferentes substâncias em amostras complexas. Estas ferramentas auxiliam os peritos a determinar se o material encontrado é de origem humana ou animal e, por exemplo, em caso de duas amostras muito parecidas, as diferentes origens e quantidades.

## **REFERÊNCIAS**

ALLWOOD, J. W., et al. **Inter-laboratory reproducibility of fast gas chromatography–electron impact–time of flight mass spectrometry (GC–EI–TOF/MS) based plant metabolomics.** *Metabolomics* 5.4 (2009): 479-496.

ANNIS, D. A., et al. **Affinity selection-mass spectrometry screening techniques for small molecule drug discovery.** *Current opinion in chemical biology* 11.5 (2007): 518-526.

BENSON, S., et al. **Forensic applications of isotope ratio mass spectrometry—a review.** *Forensic Science International* 157.1 (2006): 1-22.

IFA, D. R., et al. **Forensic applications of ambient ionization mass spectrometry.** *Analytical and bioanalytical chemistry* 394.8 (2009): 1995-2008.

LUEDEMANN, A, et al. **TagFinder for the quantitative analysis of gas chromatography—mass spectrometry (GC-MS)-based metabolite profiling experiments.** *Bioinformatics* 24.5 (2008): 732-737.

MARQUET, P.;LACHATRE G. **Liquid chromatography–mass spectrometry: potential in forensic and clinical toxicology.** *Journal of Chromatography B: Biomedical Sciences and Applications* 733.1 (1999): 93-118.

MARQUET, P. **Progress of liquid chromatography–mass spectrometry in clinical and forensic toxicology.** *Therapeutic drug monitoring* 24.2 (2002): 255-276.

MAURER, H. H. **Hyphenated mass spectrometric techniques—indispensable tools in clinical and forensic toxicology and in doping control.** *Journal of Mass Spectrometry* 41.11 (2006): 1399-1413.

MAURER, H. H. **Liquid chromatography–mass spectrometry in forensic and clinical toxicology.** *Journal of Chromatography B: Biomedical Sciences and Applications* 713.1 (1998): 3-25.

- MAURER, H. H. **Systematic toxicological analysis of drugs and their metabolites by gas chromatography—mass spectrometry.** Journal of Chromatography B: Biomedical Sciences and Applications 580.1 (1992): 3-41.
- MORELATO, M., et al. **Forensic applications of desorption electrospray ionisation mass spectrometry (DESI-MS).** Forensic science international 226.1 (2013): 10-21.
- MURPHY, R. C.; HANKIN J. A.; BARKLEY R. M. **Imaging of lipid species by MALDI mass spectrometry.** Journal of lipid research 50.Supplement (2009): S317-S322.
- PETERS, F. T.; REMANE, D. **Aspects of matrix effects in applications of liquid chromatography—mass spectrometry to forensic and clinical toxicology—a review.** Analytical and bioanalytical chemistry 403.8 (2012): 2155-2172.
- PETERS, F. T. **Recent advances of liquid chromatography—(tandem) mass spectrometry in clinical and forensic toxicology.** Clinical biochemistry 44.1 (2011): 54-65.
- PITT, J. J. **Principles and applications of liquid chromatography-mass spectrometry in clinical biochemistry.** ClinBiochem Rev 30.1 (2009): 19-34.
- TANAKA, K., et al. **"Protein and polymer analyses up to m/z 100 000 by laser ionization time-of-flight mass spectrometry."** Rapid communications in mass spectrometry 2.8 (1988): 151-153.
- VAN B., Jan F., et al. **Liquid chromatography—mass spectrometry in forensic toxicology.** Mass spectrometry reviews 19.4 (2000): 165-214.
- YATES, J. R.; CRISTIAN I. R.; ALEKSEY N. **Proteomics by mass spectrometry: approaches, advances, and applications.** Annual review of biomedical engineering 11 (2009): 49-79.

## **AGRADECIMENTOS**

Ao professor Dr. Marciano Régis Rubini pelas contribuições ao conteúdo deste trabalho.

Não foram declarados conflitos de interesse associados à publicação deste artigo.