

## APLICAÇÃO DO ÍNDICE DE RETENÇÃO LINEAR EM GC-MS

**Ettore Ferrari Júnior<sup>1\*</sup>, Camila Martins Silva<sup>2</sup>, Rodrigo Lima<sup>1</sup>, Robiedson Romeiro Damasceno<sup>1</sup>, Luisa Pereira e Ferreira<sup>1</sup>, Bruno Henrique Monteiro Leite<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Instituto de Criminalística/PCDF, Brasília, Distrito Federal

<sup>1</sup> Instituto de Química/IQ-UnB, Brasília, Distrito Federal

\*Autor; e-mail: [ettore.ferrari@pccdf.df.gov.br](mailto:ettore.ferrari@pccdf.df.gov.br)

### RESUMO

Em análises por GC-MS, o tempo de retenção (TR) é um parâmetro que, devido às condições experimentais (coluna, programa de temperatura, etc), é suscetível a variações que podem prejudicar a identificação de um analito. Por ser menos suscetível a essas variações, o índice de retenção linear (IRL) tem sido aplicado na identificação de substâncias em análises por GC-MS. Este trabalho tem como objetivo a avaliação do IRL na rotina analítica do LQFF/PCDF, entre 2020 e 2022.

**Palavras-chave:** GC-MS, índice de retenção linear, tempo de retenção.

**Introdução:** O uso de índices de retenção, inicialmente proposto por Kováts, para análises isotérmicas, e adaptado por Van den Dool e Kratz, para programação linear de temperatura (IRL), é a expressão do TR relativo aos 2 n-alcenos eluídos antes e depois do analito de interesse, sendo menos dependente às condições do método (coluna, fluxo, etc), quando comparado com o TR. O uso do IRL facilita a identificação de analitos, incluindo novas substâncias, produzindo valores mais estáveis ao longo do tempo, além de permitir o compartilhamento de informações entre laboratórios. Entretanto, para o emprego do IRL, é preciso estabelecer critérios de aceitação, como a variação do IRL aceitável.

**Objetivos:** Avaliar o emprego do IRL na rotina forense, avaliando a variação dos IRL e TR de cada substância, entre 2020 e 2022<sup>1,2</sup>.

**Métodos:** Agilent 7890A/5975C GC-MS: cols. DB-5 ms (30m) e DB-1 ms (4 e 30m), (0,25 mm I.D., 0,25 µm); injeção: 1 µL, split 20:1; He: 1 ou 4 mL/min (col. 30m/4m); injetor: 280 °C; forno (30m): 100 °C, por 1 min, 20 °C /min, até 312 °C, por 4,3 min; forno (4m): 50 °C, 20 °C /min, até 280 °C, por

7 min. MS: EI: 70 eV; scan: m/z 40-550; fonte de íons (280 °C); interface (250 °C). Mix QC (200 µg/mL): benzocaína (BZC), cafeína (CAF), cocaína (COC) e flunitrazepam (FLU). N-alcenos: C7-C40. As variações dos TR e IRL foram avaliadas e comparadas com critérios de aceitação<sup>1,2</sup> (TR ± 2% e IRL ± 1%).

**Resultados:** A tabela 1 mostra os valores de TR de BZC, CAF, COC e FLU, CV < 2%, exceto FLU, (CV=2,41 %), coluna DB-1 ms, 30m. Todos os valores de IRL apresentaram CV ≤ 0,7%.

Tabela 1. TR e IRL da solução QC

QC	Coluna DB-5ms (30m) <sup>a</sup>		Coluna DB-1ms (30m) <sup>b</sup>		Coluna DB-1ms (4m) <sup>c</sup>	
	TR (min) (CV %)	IRL (min) (CV %)	TR (min) (CV %)	IRL (min) (CV %)	TR (min) (CV %)	IRL (min) (CV %)
BZC	6,68 (0,95)	1592 (0,59)	6,39 (1,53)	1534 (0,18)	2,87 (1,23)	1513 (0,62)
CAF	8,21 (0,45)	1866 (0,35)	7,88 (1,30)	1795 (0,18)	4,07 (0,88)	1740 (0,34)
COC	10,12 (0,90)	2258 (0,20)	9,83 (0,97)	2209 (0,22)	5,89 (1,10)	2144 (0,37)
FLU	11,99 (1,43)	2701 (0,28)	11,68 (2,41)	2626 (0,27)	7,38 (0,57)	2518 (0,40)

a:744 dias, n=252; b: 773 dias, n=114, c:405 dias, n=47

**Conclusão:** Variação de IRL < TR, demonstrando ser uma ferramenta mais precisa e robusta para identificação de analitos, incluindo novas substâncias, além de permitir o compartilhamento de TR/IRL entre laboratórios.

### Referências bibliográficas

<sup>1</sup>GTFCh. Guideline for quality control in forensic-toxicological analyses Purview. 2009.

<sup>2</sup>UNODC. Guidance for the Validation of Analytical Methodology and Calibration of Equipment used for Testing of Illicit Drugs in Seized Materials and Biological Specimens. 2009.

Realização