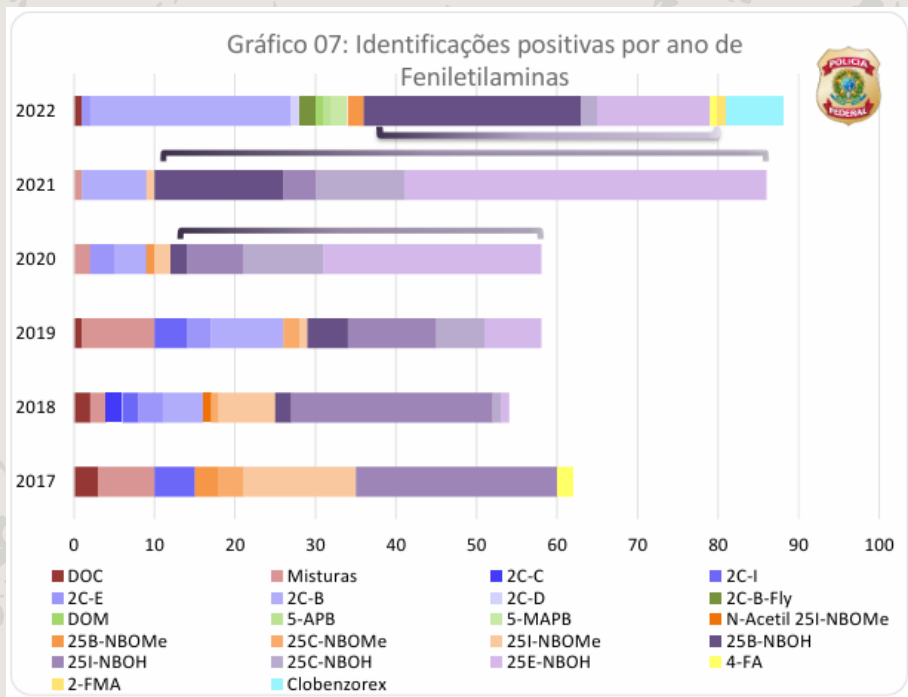


INFOGRÁFICO – INSTRUÇÕES PARA USO DA QUÍMICA COMPUTACIONAL NO DESENVOLVIMENTO DE SPOT TESTE DE NBOME E NBOH



O último relatório da Polícia Federal sobre drogas sintéticas, mostra que 2022 foi o ano com o maior número de feniletilaminas identificadas. Houve um aumento constante nas detecções desse grupo de substâncias ao longo dos anos: 43 em 2018, 50 em 2019, 58 em 2020, 87 em 2021 e 88 em 2022. Além disso, nota-se que os métodos tradicionais usados nos laboratórios de química forense não estão identificando corretamente as feniletilaminas. A presença de contaminantes tem causado falsos positivos e falsos negativos, interferindo nos resultados dos laudos periciais.



1 QUÍMICA COMPUTACIONAL

- Desenvolver spot testes rápidos e eficazes para identificar drogas de abuso (NBOMe e NBOH) usando Química Computacional.
- A química computacional auxilia na previsão de reações químicas e na seleção de reagentes.

2 PROCESSO OPERACIONAL

Passo 1: Identificação da Substância-Alvo no site do pubchem

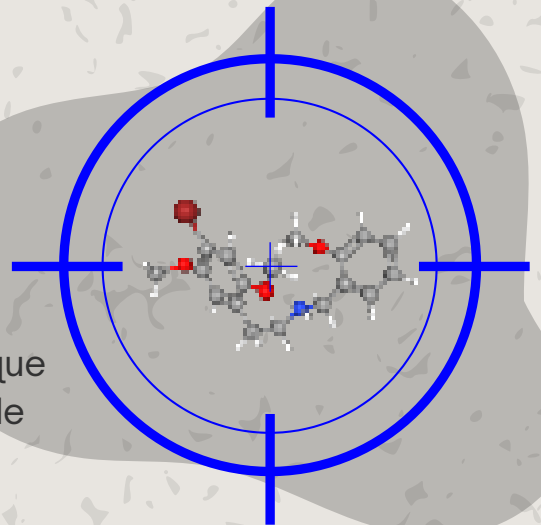
- Estudo molecular de NBOMe e NBOH utilizando química computacional.

Passo 2: Seleção de Reagentes

- Análise computacional para escolher reagentes que causem uma reação visual específica (mudança de cor) com NBOMe/NBOH.

Passo 3: Simulação de Reações no software Origin

- Simulações virtuais de interações químicas entre as drogas e os reagentes, permitindo ajustes precisos.



3 VANTAGENS

- Rapidez: Redução no tempo de identificação.
- Precisão: Alta taxa de acerto na detecção de NBOMe e NBOH.
- Custo-benefício: Diminuição de custos laboratoriais com testes rápidos e eficientes.

4 DESCOBERTAS

Com o seguimento desses procedimentos operacionais ou instruções de trabalho, evidenciam-se um método eficaz no desenvolvimento de spot testes rápidos, mais sensíveis que ajudam a reduzir a identificação errônea de novas substâncias psicoativas (NSP).



REALIZAÇÃO

Universidade Federal do Sul e do Sudeste do Pará Instituto de Geociências e Engenharias Programa de Pós-Graduação em Ciências Forenses Termo de Outorga nº 046/2021 FAPESPA e a bolsa de pesquisa FAPESPA convênio 16/2022

UNIFESSPA | PROPIT

Fapespa
Fundação de Amparo à Pesquisa
do Estado do Pará

renorbio
rede nordeste de biotecnologia



COMO REFERENCIAR ESSA OBRA

COROVIL, Estefany Santos; BISPO, Vanessa Moura; LAGES, Amanda Gabriele da Silva; ALENCAR, Wagner Soares de; LIMA, Francisco das Chagas Alves. **Instruções para uso da Química Computacional no desenvolvimento de spot teste de NBOMe e NBOH.** In: SÉRIE BRASILEIRA DE CIÊNCIAS FORENSES E CIRCUITO GAMEART FORENSE. Programa de pós graduação em Ciências Forenses - UNIFESSPA 2024.