



UTMACH

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y DE LA SALUD

CARRERA DE BIOQUÍMICA Y FARMACIA

QUIMIOMETRÍA COMO MÉTODO DE EVALUACIÓN Y
CLASIFICACIÓN DE MUESTRAS EN EL ANÁLISIS DE COCAÍNA EN
SÓLIDOS, DISOLUCIONES Y TEJIDOS IMPREGNADOS

ALVARADO SUAREZ LUIS EDUARDO
BIOQUÍMICO FARMACÉUTICO

MACHALA
2021



UTMACH

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y DE LA SALUD

CARRERA DE BIOQUÍMICA Y FARMACIA

QUIMIOMETRÍA COMO MÉTODO DE EVALUACIÓN Y
CLASIFICACIÓN DE MUESTRAS EN EL ANÁLISIS DE COCAÍNA
EN SÓLIDOS, DISOLUCIONES Y TEJIDOS IMPREGNADOS

ALVARADO SUAREZ LUIS EDUARDO
BIOQUÍMICO FARMACÉUTICO

MACHALA
2021



UTMACH

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y DE LA SALUD

CARRERA DE BIOQUÍMICA Y FARMACIA

EXAMEN COMPLEXIVO

QUIMIOMETRÍA COMO MÉTODO DE EVALUACIÓN Y CLASIFICACIÓN DE
MUESTRAS EN EL ANÁLISIS DE COCAÍNA EN SÓLIDOS, DISOLUCIONES Y
TEJIDOS IMPREGNADOS

ALVARADO SUAREZ LUIS EDUARDO
BIOQUÍMICO FARMACÉUTICO

SEGURA OSORIO MARISELA BRIGITTE

MACHALA, 26 DE ABRIL DE 2021

MACHALA
26 de abril de 2021

Examen Complexivo - Luis Alvarado

por Luis Alvarado

Fecha de entrega: 13-abr-2021 03:17p.m. (UTC-0500)

Identificador de la entrega: 1558338219

Nombre del archivo: Examen_Complexivo_-_Luis_Alvarado.docx (190.34K)

Total de palabras: 3073

Total de caracteres: 17585

CLÁUSULA DE CESIÓN DE DERECHO DE PUBLICACIÓN EN EL REPOSITORIO DIGITAL INSTITUCIONAL

El que suscribe, ALVARADO SUAREZ LUIS EDUARDO, en calidad de autor del siguiente trabajo escrito titulado Quimiometría como método de evaluación y clasificación de muestras en el análisis de cocaína en sólidos, disoluciones y tejidos impregnados, otorga a la Universidad Técnica de Machala, de forma gratuita y no exclusiva, los derechos de reproducción, distribución y comunicación pública de la obra, que constituye un trabajo de autoría propia, sobre la cual tiene potestad para otorgar los derechos contenidos en esta licencia.

El autor declara que el contenido que se publicará es de carácter académico y se enmarca en las disposiciones definidas por la Universidad Técnica de Machala.

Se autoriza a transformar la obra, únicamente cuando sea necesario, y a realizar las adaptaciones pertinentes para permitir su preservación, distribución y publicación en el Repositorio Digital Institucional de la Universidad Técnica de Machala.

El autor como garante de la autoría de la obra y en relación a la misma, declara que la universidad se encuentra libre de todo tipo de responsabilidad sobre el contenido de la obra y que asume la responsabilidad frente a cualquier reclamo o demanda por parte de terceros de manera exclusiva.

Aceptando esta licencia, se cede a la Universidad Técnica de Machala el derecho exclusivo de archivar, reproducir, convertir, comunicar y/o distribuir la obra mundialmente en formato electrónico y digital a través de su Repositorio Digital Institucional, siempre y cuando no se lo haga para obtener beneficio económico.

Machala, 26 de abril de 2021



ALVARADO SUAREZ LUIS EDUARDO
0704316066

RESUMEN

El presente estudio, se enfocó a la relación que tiene la quimiometría como procedimiento en el análisis de muestras de cocaína y los diferentes dispositivos que utilizan modelos quimiométricos para el estudio cuantitativo y cualitativo de sustancias controladas. De esta forma, el objetivo general es analizar la quimiometría como método de evaluación y clasificación en el análisis de cocaína para determinación rápida del analito en el estudio en muestras en sólidos, disoluciones y tejidos impregnados. Asimismo, como objetivos específicos, se planteó investigar la quimiometría; establecer los métodos de análisis de cocaína convencionales y describir la espectroscopia infrarroja como método para la identificación de cocaína. Los resultados de la investigación permitieron conocer que la quimiometría utiliza técnicas de clasificación como el análisis de componentes principales, análisis de conglomerados, análisis discriminante lineal. Dentro de los métodos de análisis de cocaína están las pruebas colorimétricas, la cromatografía, así como la espectroscopia infrarroja. Se concluyó que en la espectroscopia infrarroja existen procedimientos como el NIR y MIR que, en combinación con técnicas quimiométricas, contribuyen a la identificación de muestras de cocaína en polvo, materiales impregnados y en líquidos, mostrando en ambos procedimientos un alto grado de exactitud y precisión en sus respectivos análisis, demostrando que la quimiometría permite evaluar y clasificar de forma rápida (in situ) las muestras en el análisis de cocaína sin destrucción de la evidencia.

Palabras clave: quimiometría, cocaína, drogas, espectroscopia infrarroja cercana, espectroscopia infrarroja media.

ABSTRACT

The present study focused on the relationship that chemometrics has as a procedure in the analysis of cocaine samples and the different devices that use chemometric models for the quantitative and qualitative study of controlled substances. In this way, the general objective is to analyze chemometrics as a method of evaluation and classification in the analysis of cocaine for rapid determination of the analyte in the study in samples in solids, solutions and impregnated tissues. Likewise, as specific objectives, it was proposed to investigate chemometrics; establish conventional cocaine analysis methods and describe infrared spectroscopy as a method for cocaine identification. The results of the research allowed to know that chemometrics uses classification techniques such as principal component analysis, cluster analysis, linear discriminant analysis. Among the cocaine analysis methods are colorimetric tests, chromatography, as well as infrared spectroscopy. It was concluded that in infrared spectroscopy there are procedures such as NIR and MIR that, in combination with chemometric techniques, contribute to the identification of cocaine samples in powder, impregnated materials and in liquids, showing a high degree of accuracy and precision in both procedures. in their respective analyzes, demonstrating that chemometry allows the rapid evaluation and classification (in situ) of the samples in the cocaine analysis without destroying the evidence.

Keywords: chemometry, cocaine, drugs, near infrared spectroscopy, mid infrared spectroscopy.

ÍNDICE

	Pág.
RESUMEN	1
ABSTRACT	2
ÍNDICE	3
ÍNDICE DE TABLAS	4
ÍNDICE DE FIGURAS	5
1. INTRODUCCIÓN	6
2. DESARROLLO	8
2.1 Quimiometría	8
2.1.1 Propósito e importancia de la Quimiometría	8
2.1.2 Quimiometría en el análisis de cocaína	8
2.2 Tráfico ilícito de drogas	9
2.2.1 Formas del tráfico ilícito de cocaína	10
2.2.2 Protocolo para la identificación de cocaína en Ecuador	10
2.2.3 Métodos de análisis de cocaína convencionales para incautaciones de drogas	11
2.2.4 Métodos de determinación de cocaína en laboratorios forenses modernos	12
2.3 Espectroscopía infrarroja para la identificación de cocaína	13
2.3.1 Procedimiento de medidas en NIR y MIR para la determinación de muestras de cocaína	13
2.3.2 Beneficios de los principales instrumentos IR	14
3. CONCLUSIONES	15
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	16
ANEXOS	19

ÍNDICE DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1. Técnicas quimiométricas de clasificación de perfiles de drogas	9
Tabla 2. Presentaciones de la cocaína	10
Tabla 3. Rangos permitidos para la tenencia de tipos de cocaína en Ecuador	10
Tabla 4. Métodos convencionales para la detección y análisis de droga	12
Tabla 5. Métodos modernos para la determinación de cocaína en laboratorios forenses	12
Tabla 6. Comparación del NIR y MIR	13
Tabla 7. Procedimiento de medidas en NIR y MIR aplicadas a muestras de cocaína	13
Tabla 8. Beneficios de los instrumentos de espectroscopia infrarroja IR	14

ÍNDICE DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Protocolo para la identificación de cocaína en Ecuador	11

1. INTRODUCCIÓN

A nivel mundial, el tráfico de drogas se concibe como una serie de relaciones entre países, su crecimiento se da como resultado de la presencia de actos de corrupción; por otra parte, los países con procesos más estrictos de control, hace que la cocaína, la heroína y el cannabis, sean más caras, lo que provoca que los países que están mejor posicionados en vigilancia y economía mundial aumenten los márgenes de consumo de drogas ilícitas¹.

En Ecuador, esta situación ha ocasionado problemas con afectaciones sociales, económicas y políticas, con el surgimiento de manifestaciones de grupos de delincuencia organizada. El tráfico de drogas en el país comprende actividades como la compra, movilización de insumos precursores, creación de instalaciones clandestinas para la comercialización, así como la infiltración de sus redes en organizaciones para el lavado de dólares². En consecuencia, el combate al tráfico de drogas precisa de la intervención de la población, así como de las instituciones públicas y privados, con el propósito de evitar o minimizar la práctica de hechos delictivos

En este sentido, desde una perspectiva técnica-profesional es necesario contribuir continuamente para poder alterar o reducir su impacto. De esta forma se puede aportar con la inteligencia forense, la cual se centra en crear productos de información para la vigilancia proactiva, dentro del cual se encuentran el desarrollo de los perfiles químicos y físicos, junto con técnicas quimiométricas, que ayudan a resaltar patrones de datos en casos forenses. En relación con las drogas ilícitas, estos patrones hacen referencia a las tendencias de los lotes, los vínculos entre las muestras, la ubicación geográfica o la ruta de síntesis³.

El presente estudio, se enfocó en los aspectos de los vínculos entre las muestras, considerando la técnica quimiométrica de la espectroscopia de infrarrojo de tipo cercano (NIR), así como el infrarrojo medio (MIR). En este sentido el NIR es procedimiento rápido y no destructiva que proporciona un análisis de prácticamente cualquier matriz, dentro sus principales ventajas se encuentran que las muestras no requieren pretratamiento, además el análisis rápido y no invasivo, siendo utilizado como un método para la verificación medicamentos⁴

Adicionalmente, los equipos portátiles NIR, presentan un apropiado desempeño en el área de la química forense, los cuales permiten obtener datos cualitativos y

cuantitativos, simultáneamente, posibilitando la construcción de modelos para determinar la conformidad las sustancias de estudio⁵. La aplicación de espectrómetros NIR han demostrado un buen rendimiento para el análisis farmacéutico cualitativo, consiguiendo la identificación de 140 sustancias diferentes, la mayoría de las cuales eran sustancias controladas (como cocaína, heroína, oxicodona, diazepam) ⁶.

En relación a la espectroscopia de infrarrojo de tipo medio (MIR) es una técnica de gran importancia para obtener información cuantitativa y cualitativa en tiempo real de analitos⁷, la ventaja desde una perspectiva estructural y de composición de la muestra radica en que éste muestra señales espectrales que ayudan al fácil reconocimiento e interpretación de la naturaleza molecular la de sustancia⁸.

Bajo estos antecedentes, la problemática se centra en el desconocimiento de las técnicas como la quimiometría, cuyas aplicaciones permitirían evaluar y clasificar de forma rápida las muestras en el análisis de cocaína, impregnadas en distintos elementos, ya sean en sólidos, disoluciones o en tejidos. De esta forma se plantea los siguientes objetivos:

Objetivos

Objetivo general

Analizar la quimiometría como método de evaluación y clasificación en el análisis de cocaína para determinación rápida del analito en el estudio en muestras en sólidos, disoluciones y tejidos impregnados.

Objetivos específicos

- Investigar los fundamentos teóricos de la quimiometría en el análisis de cocaína.
- Establecer los métodos de análisis de cocaína convencionales empleados por los organismos de regulación nacional para determinación del tráfico ilícito.
- Describir la espectroscopia infrarroja como método quimiométrico para la identificación de cocaína en sólidos, disoluciones y tejidos impregnados.

Hipótesis

La quimiometría es un método que permite evaluar y clasificar de forma rápida las muestras en el análisis de cocaína.

2. DESARROLLO

2.1 Quimiometría

La quimiometría es una disciplina que emplea procedimientos y técnicas provenientes de las matemáticas y estadística, vinculado a los problemas analíticos para la determinación de parámetros cuantitativos e identificación de sustancias químicas, es decir, para la realización de todo tipo de análisis químico⁹.

Actualmente, con la introducción de la tecnología, esta disciplina ha cobrado relevancia por la efectividad de los equipos instrumentales para la obtención de información y procesamiento de gran cantidad de datos numéricos para los análisis de las sustancias. En consecuencia, la quimiometría es la ciencia que estudia los procesos a través de los cuales se transforman las señales analíticas y datos de complejidad relevante en información.

2.1.1 Propósito e importancia de la Quimiometría

La Quimiometría puede explicarse como una forma de reconocimiento de un compuesto químico a través de una matriz de datos, en el cual se establecen determinadas mediciones de las características de dicha sustancia. Su aplicación es válida para distintos procesos de análisis de modelos con el propósito de saber el contenido oculto en un conjunto de datos, establecer las relaciones entre evidencias químicas o cúmulos de estas; siendo efectivas para la realización de los distintos métodos de trabajo, tales como: el Análisis de exploración de variables, métodos para clasificar y métodos de estadística multivariada¹⁰.

La identificación de sustancias compuestas es una tarea rutinaria en el ambiente investigativo pericial en las especialidades de química y biología. La introducción de los métodos como la cromatografía (TLC y GC) y espectrometría (UV) ha permitido el incremento sustancial de la eficacia general de la clasificación de sustancias compuestas para el desarrollo de tareas de análisis forense¹¹.

2.1.2 Quimiometría en el análisis de cocaína

La Quimiometría como disciplina metrológica que utiliza conocimientos matemáticos, principalmente métodos estadísticos, enfocados al análisis de procesos químicos. Las técnicas quimiométricas de clasificación que generalmente se utilizan en el establecimiento de perfiles de drogas comprenden los siguientes:

Tabla 1. Técnicas quimiométricas de clasificación de perfiles de drogas

Técnicas	Descripción	Importancia
<i>Análisis de componentes principales (PCA)</i> ¹²	Técnica de reducción de una serie inicial de variables observables que no presentan correlaciones entre sí, a fin de obtener otra serie de variables no observables que constituyen una combinación de las variables originales de las cuales es posible extraer información de las características del sistema en estudio.	Permite una representación reducida de la información de las variables (componentes de una muestra) encontrando las relaciones entre ellas y ordenándolas por importancia.
<i>Análisis clúster o de conglomerados (HCA)</i> ¹³	Procedimiento de clasificación para detectar y describir subgrupos de variables homogéneas en base de los valores observados.	Ayuda a cuantificar el grado de similitud de los componentes de la muestra, en el caso de las proximidades, y analizar el grado de diferencia, en el caso de las distancias entre variables.
<i>Análisis discriminante lineal (LDA)</i> ¹⁴	Técnica utilizada para identificar si existen diferencias significativas entre g grupos de una muestra a partir del análisis de los n datos de un conjunto p de variables.	Explica las diferencias y establece procesos de clasificación de nuevas observaciones.

Elaboración: El autor




2.2 Tráfico ilícito de drogas

El tráfico ilícito de drogas es la acción de tipo ilegal que promueve el consumo de sustancias narcóticas que en el ámbito jurídico se encuentran prohibidas, las cuales provienen de la producción, comercialización de estas sustancias¹⁵, las cuales constituyen una amenaza para la seguridad y salud de los Estados.

En las Naciones Unidas en su Oficina contra la Droga y el Delito (UNODC), indica en su reporte del 2016 sobre drogas, estimó que su consumo fue de alrededor de 247 millones de personas, de las cuales 29 millones desarrollaron trastornos adictivos, mientras que para el año 2014, se calculó que aproximadamente 200.000 personas han fallecido por esta causa¹⁶.

La cocaína es una sustancia estupefaciente extraída de las hojas de la planta de coca, que tiene su origen en Sudamérica. De igual forma que las anfetaminas, tiene propiedades estimulantes sobre el sistema nervioso central. Su presentación puede ser:

Tabla 2. Presentaciones de la cocaína

Presentación	Descripción	
Clorhidrato de cocaína ¹⁷	Que es una sustancia empleada como anestésico local	
Polvo fino, blanco ¹⁷	Semejante al cristal, que en ocasiones puede presentarse en trozos de mayor tamaño conocido en las calles como rocas	
Pasta de coca ¹⁷	Es un producto crudo, altamente peligroso, debido a que en su composición existen sustancias como el queroseno que provoca daños a nivel pulmonar.	

Fuente: Cuerno Clavel, (2013)

2.2.1 Formas del tráfico ilícito de cocaína

En el Ecuador, para sancionar la posesión de drogas ilegales, en función de diferenciar entre consumidor, micro y narcotraficante se estableció una escala cantidades mínimas y tiempo de privación de la libertad. En el caso de la cocaína en la tabla 1 se muestra los límites permitidos para su posesión:

Tabla 3. Rangos permitidos para la tenencia de tipos de cocaína en Ecuador

Escala	Pasta base de cocaína		Clorhidrato de cocaína		Pena de privativa de libertad
	(g)		(g)		
	Mínimo	Máximo	Mínimo	Máximo	
Mínima ¹⁸	0	2	0	1	1 a 3 años
Mediana ¹⁸	2	50	1	50	3 a 5 años
Alta ¹⁸	50	2000	50	5000	5 a 7 años
Gran escala ¹⁸	2000	En adelante	5000	En adelante	10 a 13 años

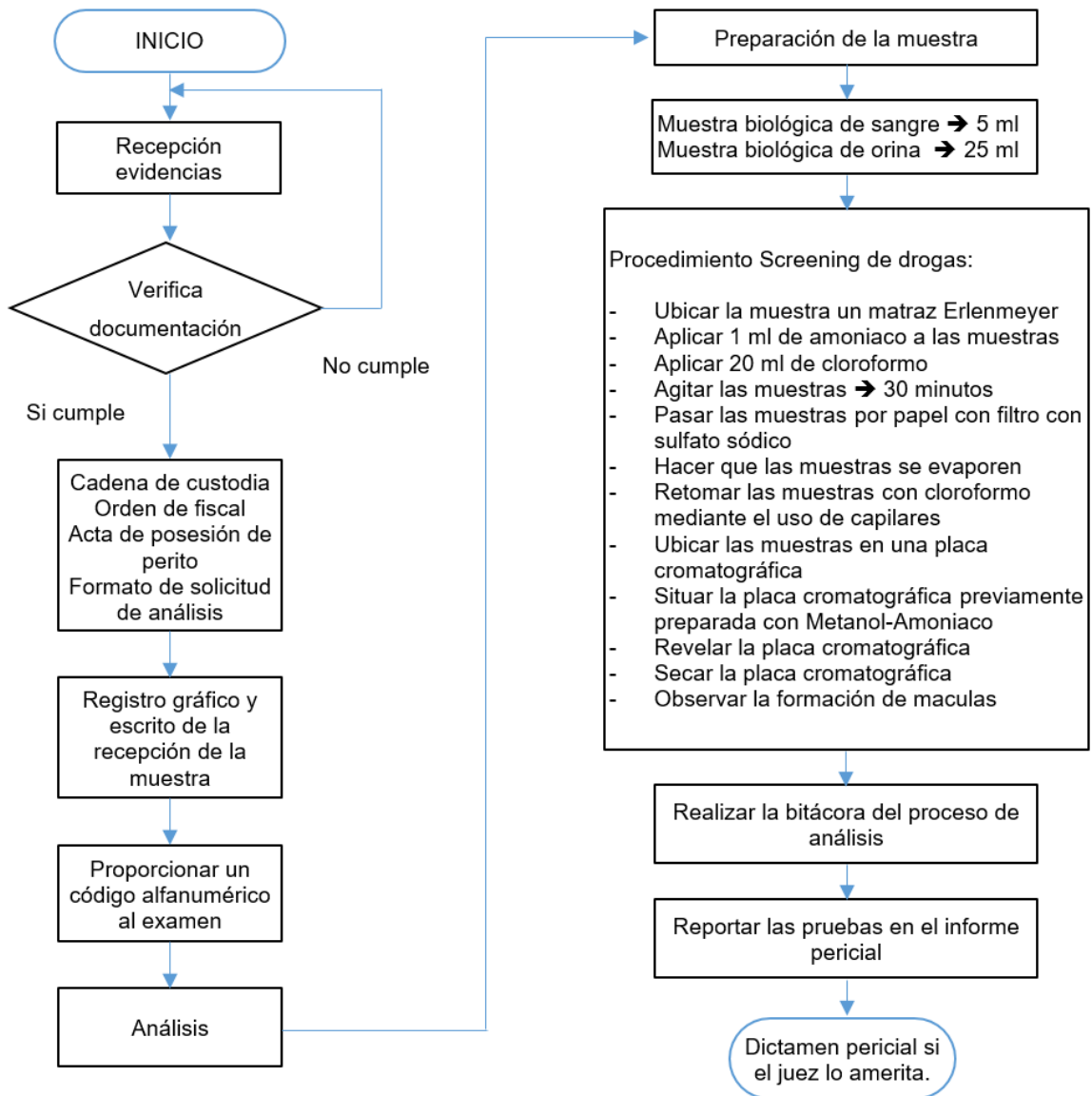
Fuente: Ministerio de Relaciones Exteriores y Movilidad Humana

2.2.2 Protocolo para la identificación de cocaína en Ecuador

El departamento de medicina legal y ciencias forenses perteneciente a la Fiscalía General del Estado¹⁹, estableció un procedimiento para identificar muestras de

cocaínas de tipo biológicas mediante la técnica de cromatografía de capa fina, y para medir los metabolitos en exámenes cualitativos a través de cromatografía de líquidos/gases con espectrometría de masas.

Figura 1. Protocolo para la identificación de cocaína en Ecuador



Fuente: Manuales de Investigación Medicina Legal y Ciencias, (2014)

2.2.3 Métodos de análisis de cocaína convencionales para incautaciones de drogas

Entre los principales métodos convencionales para la detección y análisis de droga incautada se tiene: Perros olfateadores, pruebas colorimétricas.

Tabla 4. Métodos convencionales para la detección y análisis de droga

Métodos	Descripción
<i>Perros olfateadores</i> ²⁰	El perro tiene una capacidad inherente para detectar y reconocer un gran espectro de olores presentes de forma residual, debido, entre otros factores a la cantidad de receptores olfativos. Esta capacidad permite una media de 86.8% de eficacia en detección de drogas, siendo los perros más habituales para este trabajo el Pastor Alemán y el Labrador Retriever.
<i>Pruebas colorimétricas</i> ^{21,22}	Técnica cualitativa y cuantitativa sobre sustancias en disolución, su aplicación legal es para determinar la concentración de una gran variedad de moléculas. En la detección de cocaína, se encuentra la Prueba Scott o de tiocianato de cobalto modificado, consiste en colocar la sustancia dudosa en un recipiente, al cual se le agrega el reactivo tiocianato de cobalto y agitar; aparece un color azul si contiene cocaína.

Elaboración: El autor

2.2.4 Métodos de determinación de cocaína en laboratorios forenses modernos

Los métodos y técnicas instrumentales más utilizadas en los Laboratorios de Control de Drogas se describen a continuación:

Tabla 5. Métodos modernos para la determinación de cocaína en laboratorios forenses

Métodos	Descripción
Cromatografía de gases (GC-FID) ¹²	Técnica e instrumento preferido en los departamentos de estupefacientes para analizar muestras. Mediante la técnica GC-FID la muestra vaporizada separa los diferentes componentes, llega al detector de ionización donde los diferentes compuestos de la muestra se ionizan. Los iones de la separación de los componentes generan una corriente eléctrica que mide una señal que corresponde con el cromatograma en el que aparecen los diferentes picos de las sustancias.
Cromatografía de gases de masas (GC-MS) ²³	Técnica de disociación, conformada por una etapa móvil y una fija, utilizada para la determinar muestras de drogas con propósitos forenses. En combinación con otras técnicas, es capaz de diferenciar sustancias, así como brindar datos espectrales muy específicos de las diversas muestras presentes en una mezcla sin requerir de aislarlos previamente.
Espectroscopía infrarroja (IR) ²⁴	Mediante esta técnica espectroscopía infrarroja es posible identificar y confirmar sustancias como la cocaína de forma inequívoca, en base a la determinación de un espectro único. Sus resultados se registran en picos de medición en números de onda (cm^{-1}), que indican el orden de longitud de la transmitancia.

Elaboración: El autor

2.3 Espectroscopía infrarroja para la identificación de cocaína

El funcionamiento de la espectroscopía infrarroja consiste en que la emisión infrarroja choca contra una muestra, provocando transformaciones en los estados vibracionales a nivel molecular. La región infrarroja (IR) está comprendida en el espectro de radiación con número de onda que varía entre 12800 y 10 cm^{-1} o longitudes de onda de 0.78 a 1000 μm ²⁵.

Bajo el método de espectroscopía infrarroja existen tres subdivisiones o regiones de espectro de análisis, tales como el cercano, medio y lejano (ver anexo 1). El presente estudio se enfocó en la espectroscopía infrarroja cercana y media cuyos datos comparativos se muestran a continuación:

Tabla 6. Comparación del NIR y MIR

Aspectos comparativos	Espectroscopía infrarroja cercana NIR	Espectroscopía infrarroja media MIR
Región espectral ²⁶		
<i>Longitud de onda (μm)</i>	0.78 – 2.5	2.5 – 50
<i>Número de onda (cm^{-1})</i>	12800 – 4000	4000 – 200
Tipo de medición ²⁶	Reflectancia difusa Absorción	Absorción
Tipo de análisis según las muestras ²⁶	Análisis cuantitativo en materiales comerciales sólidos o líquidos, y mezclas gaseosas	Análisis cuantitativo en muestras puras de sólidos, líquidos o gaseoso
Tipo de información analítica ⁸	Sobretonos y combinaciones de bandas de vibración fundamentales	Transiciones vibracionales fundamentales

Elaboración: El autor

Fuente: Skoog, (2008) y Restrepo, García, Combatt (2018)

2.3.1 Procedimiento de medidas en NIR y MIR para la determinación de muestras de cocaína

Tabla 7. Procedimiento de medidas en NIR y MIR aplicadas a muestras de cocaína

Tipo de procedimiento	Descripción
Procedimientos de medida en el infrarrojo cercano (NIR) ¹²	<p><i>Medición por reflexión difusa (DR-NIR) en muestras de polvo</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Instrumento espectrofotómetro: FT-NIR-MPA. (anexo 2) • Las muestras se introducen en viales de vidrio traslúcido. • Los resultados de los espectros NIR se situaron en los rangos 13500 - 3500 cm^{-1}.

Tipo de procedimiento	Descripción
Procedimientos de medida en el infrarrojo cercano (NIR) ¹²	<p><i>Medición por reflexión difusa (DR-NIR) en muestras impregnadas</i></p> <ul style="list-style-type: none"> Instrumento espectrofotómetro: FT-NIR-MPA. Para el análisis de las muestras se emplearon sondas de fibra óptica. Las medidas se realizaron en la región NIR de 14000 – 3900 cm⁻¹ <p>En el análisis cuantitativo de las mediciones obtenidas con DR-NIR se aplicaron las técnicas quimiométricas de análisis clúster (HCA) para la clasificación, y, el análisis de componentes principales (PCA) para una calibración adecuada.</p> <p>Los métodos quimiométricos (estadísticos) muestran un nivel de confianza del 95% para determinación de cocaína.</p>
Procedimientos de medida en el infrarrojo medio (MIR) ¹²	<p><i>Medición por reflexión total atenuada (ATR) en muestras de polvo</i></p> <ul style="list-style-type: none"> Instrumento: FT-IR SpectrumTwo de Perkin Elmer. (anexo 3) El proceso consistió en realizar presión directa a las muestras con el cristal ATR. Este paso se efectúa tres veces, limpiando previamente el cristal ATR. Las medidas obtenidas se promedian para elaborar posteriormente los modelos de regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS) El instrumento trabaja en la región espectral de 4000 – 400 cm⁻¹ <p><i>Medición por reflexión total atenuada (ATR) en muestras impregnadas</i></p> <ul style="list-style-type: none"> El equipamiento y procedimiento es el mismo, con la salvedad que la muestra impregnada es media por ambas caras en el mismo punto de contacto con el cristal ATR. <p><i>Medición por reflexión total atenuada (ATR) en muestras líquidas</i></p> <ul style="list-style-type: none"> Instrumento espectrofotómetro: FT-IR IFS 66/vS, accesorio ATR DuraSampleIR II y celda de 9 reflexiones. (anexo 4) El proceso consiste en agitar manualmente la muestra para homogenizarla. Con la ayuda de una jeringa se depositan muestras en el cristal del accesorio ATR, cubriéndola con la celda para evitar que se evapore. La medición se realiza por triplicado. El espectro se obtiene en la banda de 4000 – 400 cm⁻¹ <p>Para el análisis cuantitativo de las mediciones ATR-MIR, se emplearon las técnicas de HCA y PCA, adicionalmente se construyó un modelo PLS específico, para la determinación de la cocaína.</p> <p>El modelo ATR-MIR presenta coeficientes de variación menor del 1.0% para cada repetición de las medidas realizadas, considerándose un procedimiento altamente confiable para la determinación de muestras de cocaína.</p>

Fuente: Pérez (2017)

2.3.2 Beneficios de los principales instrumentos IR

Tabla 8. Beneficios de los instrumentos de espectroscopia infrarroja IR

- Las técnicas NIR y MIR tienen un alto grado de exactitud y precisión en la determinación de drogas ilegales.
- La instrumentación es relativamente económica.
- Los procedimientos se desarrollan con una mínima manipulación de las muestras, es decir, ambos procesos se consideran no destructivos permitiendo posteriores análisis en caso de necesitarlos.

-
- Mediante la aplicación de técnicas quimiométricas como análisis clúster o de conglomerados (HCA) y el análisis de componentes principales (PCA), es posible acelerar el reconocimiento de muestras tanto muestras en sólidos, disoluciones y tejidos impregnados¹².
 - Permiten la asignación de bandas en espectros de infrarrojo para la determinación de la cocaína^{27,28}, como se indica en los anexos 5 y 6 (bandas y espectros de la cocaína).
-

Elaboración: El autor

3. CONCLUSIONES

Al finalizar la investigación, se llegaron a las siguientes conclusiones:

- La quimiometría es una disciplina que utiliza procedimiento y técnicas estadísticas para el análisis de sustancias químicas; que en la clasificación de muestras de cocaína utiliza generalmente: a) análisis de componentes principales, que reduce datos mediante la combinación de variables; b) análisis de conglomerados, identifica variables homogéneas cuantificando su grado de similitud; y, c) análisis discriminante lineal, que permite reconocer variaciones significativas entre grupos de variables.
- Los métodos de análisis de cocaína convencionales empleados para la determinación del tráfico ilícito, están: la detección por canes, pruebas colorimétricas, la cromatografía de gases de ionización y de masas, así como la espectroscopia infrarroja. En el contexto ecuatoriano, los protocolos para la identificación de cocaína, se utilizan principalmente la cromatografía de capa fina para muestras biológicas, y la cromatografía de líquidos/gases con espectrometría de masas para cuantificar los metabolitos.
- La quimiometría es un método apropiado para la evaluación y clasificación de cocaína, por permitir la determinación rápida del analito en estudio en muestras sólidas, disoluciones y tejidos impregnados, aplicando técnicas estadísticas, mediante procedimientos de análisis como la espectroscopia infrarroja y el uso de dispositivos para medir espectros IR (NIR Y MIR) que colaboran a identificar de manera confiable la cocaína, derivados e inclusive los adulterantes.
- En la espectroscopia infrarroja existen procedimientos como el NIR y MIR que, en combinación con técnicas quimiométricas como análisis clúster o de conglomerados (HCA) y el análisis de componentes principales (PCA), contribuyen a la identificación de muestras de cocaína en polvo, materiales impregnados y en líquidos, mostrando ambos procedimientos un alto grado de exactitud y precisión en sus respectivos análisis; además estas técnicas no son destructivas lo que permite la conservación de las muestras.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

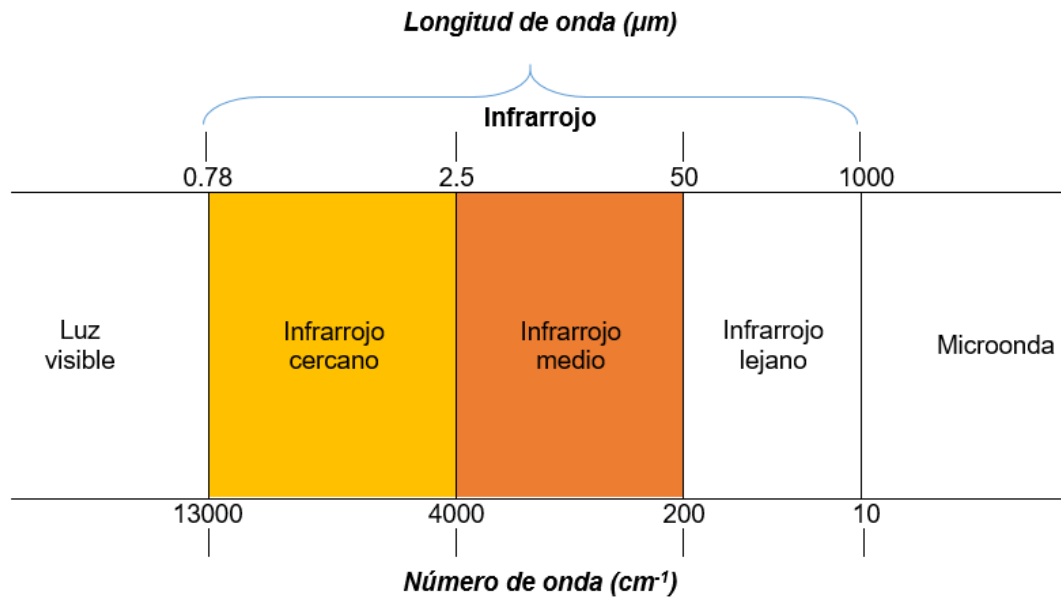
- (1) Boivin, R. Risks, Prices, and Positions: A Social Network Analysis of Illegal Drug Trafficking in the World-Economy. *Int. J. Drug Policy* **2014**, *25* (2), 235–243. <https://doi.org/10.1016/j.drugpo.2013.12.004>.
- (2) Velasco-Ortiz, J. G.; Simisterra-Masías, S. P. Epistemología Jurídica Sobre Los Delitos de Tráfico de Drogas En El Contexto Legal Del Ecuador Legal. *Polo del Conoc.* **2020**, *5* (10), 321–333. <https://doi.org/10.23857/pc.v5i10.1810>.
- (3) Popovic, A.; Morelato, M.; Roux, C.; Beavis, A. Review of the Most Common Chemometric Techniques in Illicit Drug Profiling. *Forensic Sci. Int.* **2019**, *302*, 1–18. <https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2019.109911>.
- (4) Zou, W. B.; Yin, L. H.; Jin, S. H. Advances in Rapid Drug Detection Technology. *J. Pharm. Biomed. Anal.* **2018**, *147*, 81–88. <https://doi.org/10.1016/j.jpba.2017.08.016>.
- (5) Correia, R. M.; Domingos, E.; Tosato, F.; Dos Santos, N. A.; Leite, J. D. A.; Da Silva, M.; Marcelo, M. C. A.; Ortiz, R. S.; Filgueiras, P. R.; Romão, W. Portable near Infrared Spectroscopy Applied to Abuse Drugs and Medicine Analyses. *Anal. Methods* **2018**, *10* (6), 593–603. <https://doi.org/10.1039/c7ay02998e>.
- (6) Yan, H.; Siesler, H. W. Quantitative Analysis of a Pharmaceutical Formulation: Performance Comparison of Different Handheld near-Infrared Spectrometers. *J. Pharm. Biomed. Anal.* **2018**, *160*, 179–186. <https://doi.org/10.1016/j.jpba.2018.07.048>.
- (7) De Fuentes, M.; Bosch Ojeda, C.; Sánchez Ojeda, F. Aplicación de La Espectroscopia Del Infrarrojo Medio En Química Analítica de Procesos. *Bol. Soc. Quím. Méx.* **2008**, *2* (3), 93–103.
- (8) Restrepo, D. F.; García Quintero, A.; Combatt, E. Espectroscopia de Infrarrojo En El Análisis de La Capacidad de Intercambio Catiónico de Los Suelos – Una Revisión. *J. Sci. with Technol. Appl.* **2018**, *5*, 55–65. <https://doi.org/https://doi.org/10.34294/j.jsta.18.5.35>.
- (9) Ospina, O.; Anzola Vásquez, H.; Ayala Duarte, O.; Baracaldo Martínez, A. Validación de Un Algoritmo de Procesamiento de Imágenes Red Green Blue (RGB), Para La Estimación de Proteína Cruda En Gramíneas vs La Tecnología de Espectroscopia de Infrarrojo Cercano (NIRS). *Rev Inv Vet Perú* **2020**, *31* (2), 1–7. <https://doi.org/https://doi.org/10.15381/rivep.v31i2.17940>.
- (10) Talavera-Bustamante, Isneri; Bustio-Martínez, Lázaro; Coma-Peña, Y. H.-. QUIMIOMETRIX II, Una Plataforma Automatizada Para El Procesamiento

- Multivariante de Datos Químicos y Bioquímicos. Experiencias de Aplicación. *Rev. Cuba. Química* **2013**, XXV (3), 257–265.
- (11) Silva, F. J.; Martínez-Díaz, Y.; Talavera, I.; Barca, G.; Grenot, E. METHODS FOR THE IDENTIFICATION AND CLASSIFICATION OF COMPOSITE SUBSTANCES IN SUPPORT OF FORENSIC ANALYSIS. In *Conferencia Internacional en Ciencias Computacionales e Informáticas*; 2018.
- (12) Pérez, C. M. Determinación de Cocaína Por Espectrometría Vibracional, Universitat de València, 2017.
- (13) Rubio-Hurtado, M.-J.; Vilà-Baños, R. El Análisis de Conglomerados Bietápico o En Dos Fases Con SPSS. *REIRE. Rev. d'Innovació i Recer. en Educ.* **2017**, 10 (1), 118–126. <https://doi.org/10.1344/reire2017.10.11017>.
- (14) Fontalvo-herrera, T. J.; De La Hoz-Granadillo, E. Método Conglomerado-Análisis Discriminante-Análisis Envoltante de Datos Para Clasificar y Evaluar Eficiencia Empresarial. *Entramado* **2020**, 16 (2), 46–55. <https://doi.org/10.18041/1900-3803/entramado.2.6437>.
- (15) Ruda, J. J.; Novak, F. El Tráfico Ilícito de Drogas En El Perú : El Tráfico Ilícito de Drogas En El Perú : Una Aproximación Internacional. In *Las prácticas de la resolución de conflictos en América Latina*; 2008; pp 43–72.
- (16) Valdés, A.; Vento, C.; Hernández, D.; Álvarez, A.; Díaz, G. Drogas, Un Problema de Salud Mundial. *Rev. Univ. Médica Pinareña* **2018**, 14 (2), 168–183.
- (17) Cuerno Clavel, L. Uso y Abuso de Sustancias Psicoactivas : Cultura y Sociedad *. Use and Abuse of Psychoactive Substances . Culture and Society *. *Rev. Policía Y Secur. Pública* **2013**, 5648 (2013), 65–111.
- (18) Ministerio de Relaciones Exteriores y Movilidad Humana. Contribución Del Ecuador Cuestionario Sobre La Detención Arbitraria En Relación Con Las Políticas de Fiscalización de Drogas. **2020**, 1–14.
- (19) Fiscalía General del Estado. *Manuales, Protocolos, Instructivos y Formatos Del Sistema Especializado Integral De Investigación Medicina Legal y Ciencias*; Registro Oficial N° 3018: Ecuador, 2014; pp 1–244.
- (20) Castellví Guimerá, J. La Eficacia En La Detección Canina En El Ámbito de Las Fuerzas Armadas: Propuesta de Un Estándar de Evaluación. *Sanid. Mil.* **2019**, 75 (2), 98–101. <https://doi.org/10.4321/s1887-85712019000100007>.
- (21) Aparicio Canela, E. G. Técnicas Colorimétricas. *Visión criminológica-criminalística* **2017**, No. 5, 18–23.
- (22) Argomedo Muñoz, F. M. Caracterización de Sustancias de Corte En Drogas Cocaínicas Decomisadas Por La Policía Nacional Antidrogas Del Perú En Los Años 2016 y 2017, Universidad Norbert Wiener, 2019.

- (23) Tirso, R. M. Método Analítico Para Identificación de Cocaína Mediante La Técnica Gases-Masas En El Laboratorio Del Instituto de Ciencias Forenses Del Estado de Puebla, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 2018.
- (24) Chenaz, D. L.; Mejía, G. V. Validación del método analítico para la determinación cuantitativa de heroína y cocaína por medio de Cromatografía de Gases, Universidad Central del Ecuador, 2018.
- (25) Sánchez Ordoñez, G. E. Validación Del Método de Espectroscopia Infrarroja Para La Determinación de Cannabis Sativa En Muestras Incautadas Que Ingresan Al Laboratorio de Química Forense Del Departamento de Criminalística de Chimborazo., 2015.
- (26) Skoog, D. *Principios de Análisis Instrumental*, 6.ed.; Cengage Learning Editores: México, DF, 2008.
- (27) Pérez-Alfonso, C.; Galipienso, N.; Garrigues, S.; de la Guardia, M. A Green Method for the Determination of Cocaine in Illicit Samples. *Forensic Sci. Int.* **2014**, *237*, 70–77. <https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2014.01.015>.
- (28) Méndez, J. M.; Chaparro, A. L.; Rivera, M. E. Espectroscopia Vibracional Como Una Alternativa Para La Discriminación De Drogas Ilícitas Incautadas En La Ciudad De Cúcuta. **2020**, *25*, 36–42.

ANEXOS

Anexos 1: Intervalo de la radiación infrarroja



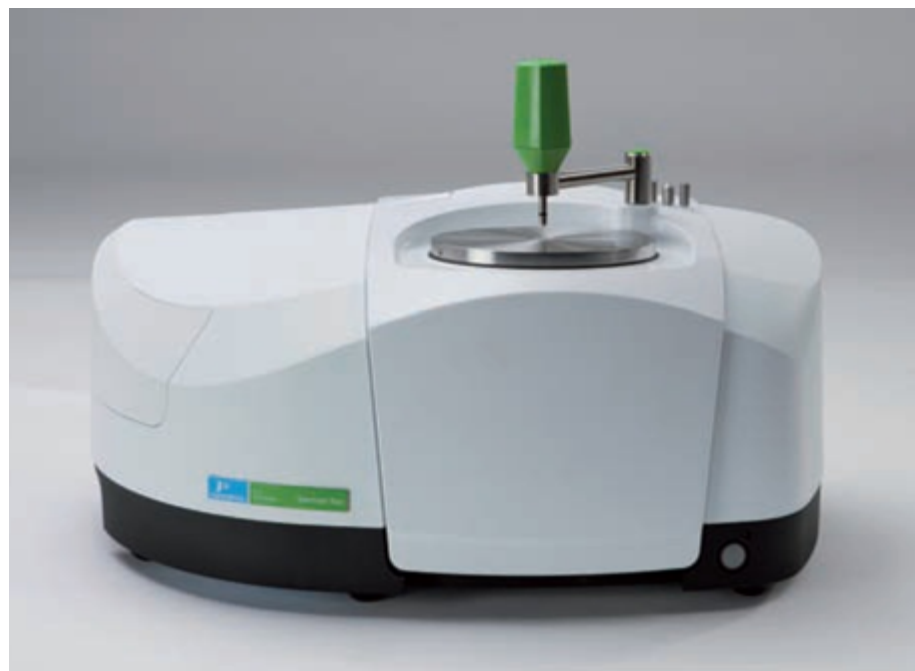
Anexos 2: Instrumento NIR de sobremesa FT-NIR-MPA



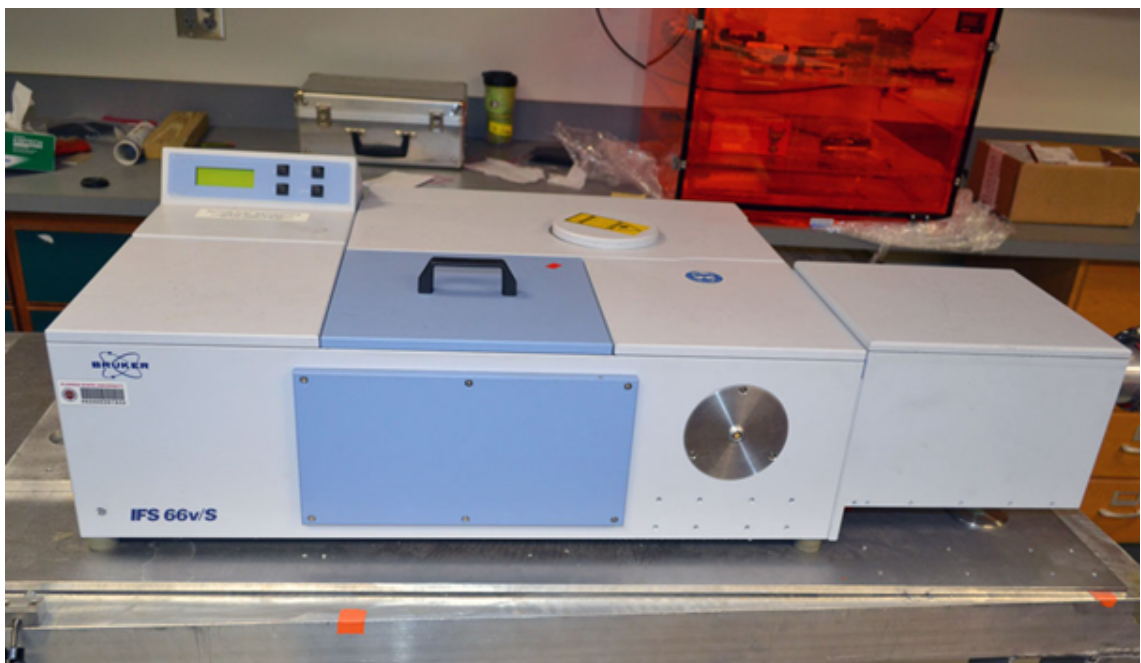
Compartimento para muestras



Anexos 3: Instrumento MIR - FT-IR SpectrumTwo de Perkin Elmer

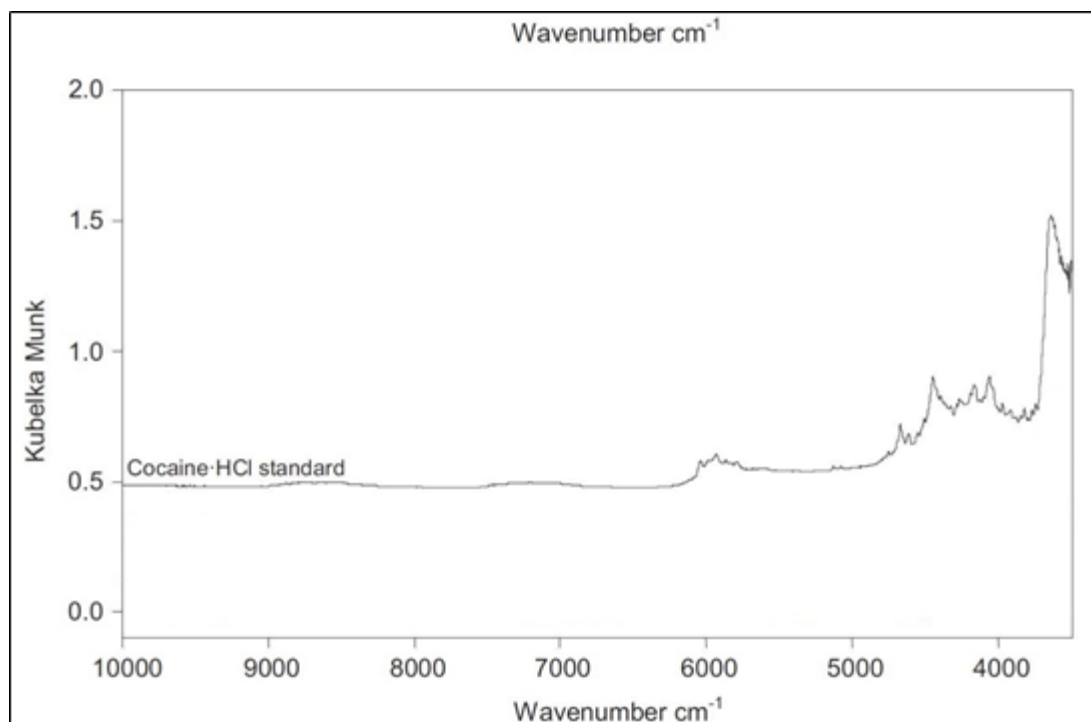


Anexos 4: Instrumento MIR - FT-IR IFS 66/vS



Anexos 5: Asignación de las principales bandas del espectro NIR de cocaína

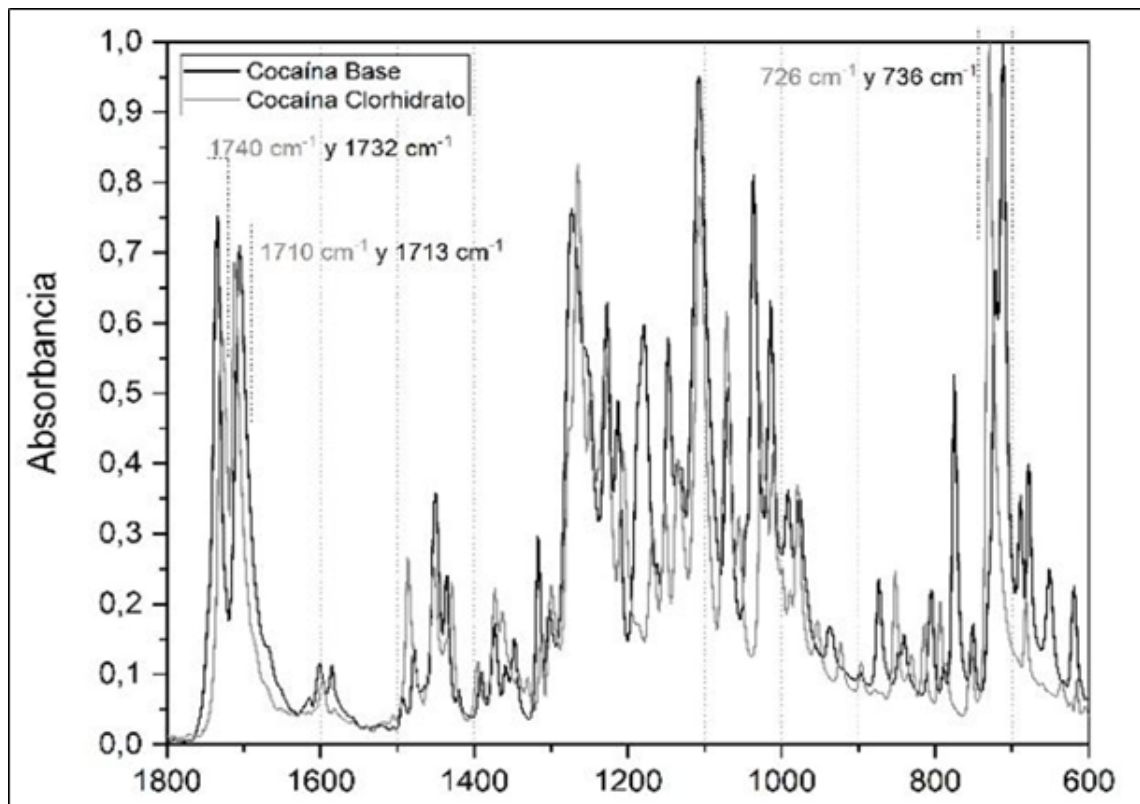
Sustancia	Número de onda (cm ⁻¹)	Longitud de onda (nm)	Vibración	Estructura
Cocaína ²⁷	8752	1143	Segundo sobretono de estiramiento C-H	Aromática
	8647	1156	Segundo sobretono de estiramiento C-H	-CH ₃
	8518	1174	Segundo sobretono de estiramiento C-H	-CH=CH-
	7350	1361	C-H estiramiento + deformación C-H	-CH ₃
	7212	1387	C-H estiramiento + deformación C-H	-CH ₂ -
	5934	1685	Primer sobretono de estiramiento C-H	Aromático
	5868	1704	Primer sobretono de estiramiento C-H	-CH ₃
	5791	1727	Primer sobretono de estiramiento C-H	-CH ₂ -
	5129	1950	Segundo sobretono de estiramiento C=O	-CO ₂ R
	4753	2104	Combinación C-H	
	4673	2140	Estiramiento =C-H + estiramiento C=C	-CH=CH-
	4613	2168	Estiramiento asimétrico C-H + combinación de la deformación C-H	
	4553	2196	Estiramiento asimétrico CH ₂ + estiramiento C=	-CH=CH-
	4450	2247	Estiramiento N-H + deformación del grupo -NH ₃ ⁺	
	4396	2275	Estiramiento C-H + deformación del grupo CH ₂	-CH ₃
	4327	2311	Estiramientos C-H + deformación del grupo C-H	-CH ₂ -
	4192	2385	Combinación de estiramientos C-H y C-C	
	4065	2460	Combinación C-H o sobretono de estiramiento simétrico C-N-C Estiramientos C-H + combinación de estiramientos C-C	



Fuente: Pérez-Alfonso, C.; Galipienso, N.; Garrigues, S.; de la Guardia, M. A (2014)

Anexos 6: Asignación de las principales bandas del espectro MIR de cocaína (base de cocaína y clorhidrato de cocaína)

Sustancia	Número de onda (cm ⁻¹)	Asignación	Sustancia	Número de onda (cm ⁻¹)	Asignación
Base de cocaína ²⁸	726	C-H	Clorhidrato de cocaína ²⁸	736	C-H Fuera de plano
	1040	C-O Y C-N		1030	C-O Y C-N
	1110	C-O Y C-N		1270	C-O Y C-N
	1280	C-O Y C-N		1489	C=C Anillo aromático
	1453	C=C Anillo aromático		1713	C=O
	1710	C=O		1732	C=O
	1740	C=O		2540	N-H
	2945	C-H, sp ³ y sp ²			



Fuente: Méndez, Chaparro, Rivera, (2020)