

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA**

**Viabilidade do emprego da espectroscopia no infravermelho próximo para  
identificação de cocaína em amostras apreendidas na rua**

Leticia Premoli Foli  
*Magister Scientiae*

**VIÇOSA - MINAS GERAIS  
2025**

**LETICIA PREMOLI FOLI**

**Viabilidade do emprego da espectroscopia no infravermelho próximo para  
identificação de cocaína em amostras apreendidas na rua**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Agroquímica, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

Orientadora: Maria do Carmo Hespanhol

**VIÇOSA - MINAS GERAIS  
2025**

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade  
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

F665v  
2025

Foli, Leticia Premoli, 1997-  
Viabilidade do emprego da espectroscopia no infravermelho próximo para identificação de cocaína em amostras apreendidas na rua / Leticia Premoli Foli. – Viçosa, MG, 2025.  
1 dissertação eletrônica (78 f.): il. (algumas color.).

Inclui anexos.

Inclui apêndice.

Orientador: Maria do Carmo Hespanhol.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Química, 2025.

Referências bibliográficas: f. 52-54.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2025.308>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Espectroscopia no infravermelho próximo. 2. Drogas - Identificação. 3. Drogas - Amostragem. 4. Cocaína. 5. Busca e apreensão. I. Hespanhol, Maria do Carmo, 1966-. II. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de Química. Programa de Pós-Graduação em Agroquímica. III. Título.

CDD 22. ed. 543.57

**LETICIA PREMOLI FOLI**

**Viabilidade do emprego da espectroscopia no infravermelho próximo para identificação de cocaína em amostras apreendidas na rua**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Agroquímica, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 19 de fevereiro de 2025.

Assentimento:

---

Leticia Premoli Foli  
Autora

---

Maria do Carmo Hespanhol  
Orientadora

Essa dissertação foi assinada digitalmente pela autora em 19/05/2025 às 12:09:32 e pela orientadora em 19/05/2025 às 15:46:06. As assinaturas têm validade legal, conforme o disposto na Medida Provisória 2.200-2/2001 e na Resolução nº 37/2012 do CONARQ. Para conferir a autenticidade, acesse <https://siadoc.ufv.br/validar-documento>. No campo 'Código de registro', informe o código **RTDM.FL5R.ZKHU** e clique no botão 'Validar documento'.

A Deus e a Marta e José Carlos, meus  
pais, pelo suporte e incentivo

## **AGRADECIMENTOS**

Este trabalho foi realizado com o apoio das seguintes agências de pesquisa brasileiras: Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

À Universidade Federal de Viçosa (UFV), ao Departamento de Química (DEQ – UFV) e ao Programa de Pós-Graduação em Agroquímica (PPAQ – UFV) por permitirem a concretização deste trabalho.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES)-Segurança Pública e Ciências Forenses (CAPES-PROCAD-SPCF/88887.808376/2023-00) pela concessão da bolsa de mestrado.

À CAPES, à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG), ao Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

À Professora Dra. Maria do Carmo Hespanhol por ter aceitado me orientar e pelos ensinamentos.

Ao Professor Dr. Celio Pasquini, pelos ensinamentos, discussões e contribuições no desenvolvimento deste trabalho.

## RESUMO

FOLI, Leticia Premoli, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2025. **Viabilidade do emprego da espectroscopia no infravermelho próximo para identificação de cocaína em amostras apreendidas na rua.** Orientadora: Maria do Carmo Hespanhol.

A espectroscopia de infravermelho próximo (NIRS), amplamente utilizada desde a década de 1970, destaca-se por sua versatilidade em diversas áreas, incluindo a forense. No Brasil, onde os índices de apreensão de drogas ilícitas, como a cocaína, são elevados, a aplicação de técnicas rápidas e confiáveis é essencial para a identificação em campo. Neste contexto, este trabalho explora o uso da NIRS para a detecção de cocaína apreendida por agentes de segurança pública, empregando dois espectrofotômetros portáteis: o NanoNIR (Texas Instruments Inc.), que opera na faixa espectral de 900 a 1700 nm, e o NeoSpectra compacto (Si-Ware Systems, Egito), que cobre comprimentos de onda entre 1350 e 2550 nm. O objetivo do projeto é aprimorar métodos de detecção de cocaína estendendo-os para a análise de amostras apreendidas na rua, auxiliando os agentes da lei com ferramentas tecnológicas eficientes que otimizam o trabalho de fiscalização e combate ao tráfico. Além de constituírem técnicas confiáveis e acessíveis, a portabilidade e a simplicidade dos dispositivos garantem maior agilidade e confiabilidade na identificação das substâncias ilícitas, promovendo avanços significativos no contexto forense brasileiro. Os resultados mostram que os métodos baseados no uso destes instrumentos apresentam desempenho suficiente para monitorar em campo amostras de rua apreendidas permitindo acessar o conteúdo de cocaína em suas duas formas químicas (base e HCl). Conclui-se também que as amostras de rua apresentam uma variabilidade grande de composição o que dificulta o uso dos métodos baseados em espectroscopia NIR.

Palavras-chave: espectroscopia de infravermelho próximo; identificação de drogas; cocaína, amostras apreendidas na rua; agentes da lei

## ABSTRACT

FOLI, Leticia Premoli, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, February, 2025. **Feasibility of using near-infrared spectroscopy to identify cocaine in samples seized on the street.** Adviser: Maria do Carmo Hespanhol.

Near-infrared spectroscopy (NIRS), widely used since the 1970s, stands out for its versatility in several areas, including forensics. In Brazil, where seizure rates of illicit drugs, such as cocaine, are high, the application of fast and reliable techniques is essential for field identification. In this context, this work explores the use of NIRS for the detection of cocaine seized by law enforcement officers, using two portable spectrophotometers: the NanoNIR (Texas Instruments Inc.), which operates in the spectral range of 900 to 1700 nm, and the compact NeoSpectra (Si-Ware Systems, Egypt), which covers wavelengths between 1350 and 2550 nm. The objective of the project is to improve cocaine detection methods by extending them to the analysis of samples seized on the street, assisting law enforcement officers with efficient technological tools that optimize the work of inspection and combating trafficking. In addition to being reliable and accessible techniques, the portability and simplicity of these devices ensure greater agility and reliability in the identification of illicit substances, promoting significant advances in the Brazilian forensic context. The results show that methods based on the use of these instruments have sufficient performance to monitor seized street samples in the field, allowing access to the content of cocaine in its two chemical forms (base and HCl). It is also concluded that street samples present a large variability in composition, which makes it difficult to use methods based on NIR spectroscopy.

Keywords: near-infrared spectroscopy ; drug identification; cocaine, street sized samples ; law enforcement

## Sumário

<b>1.</b>	<b>Introdução .....</b>	<b>1</b>
<b>2.</b>	<b>Objetivos .....</b>	<b>8</b>
<b>3.</b>	<b>Parte Experimental.....</b>	<b>9</b>
3.1.	Amostras.....	9
3.2.	Descrição dos espectrofotômetros portáteis NIR .....	9
3.3.	Protocolo de medição das amostras .....	10
3.4.	Processamento dos dados e análise quimiométrica .....	11
<b>4.</b>	<b>Resultados e discussão.....</b>	<b>13</b>
4.1.	Características dos espectros de infravermelho próximo de cocaína.....	13
4.2.	Análise de Componentes Principais (PCA) e classificação SIMCA: NeoSpectra .....	16
4.3.	Identificação da presença de cocaína e suas formas em amostras apreendidas empregando SIMCA: NeoSpectra modelo global .....	20
4.4.	Identificação da presença de cocaína e suas formas em amostras apreendidas empregando SIMCA: NeoSpectra modelo local (PE) .....	23
4.5.	Determinação do teor de cocaína empregando PLS: NeoSpectra .....	24
4.6.	Análise de Componentes Principais (PCA) e classificação SIMCA: NanoNIR .....	29
4.7.	Identificação da presença de cocaína e suas formas em amostras apreendidas empregando SIMCA: NanoNIR .....	30
4.8.	Determinação do teor de cocaína empregando PLS: NanoNIR.....	33
<b>5.</b>	<b>Conclusões.....</b>	<b>35</b>
<b>6.</b>	<b>Referências.....</b>	<b>38</b>

## 1. Introdução

No âmbito da análise de drogas ilícitas, o tempo necessário para obter uma resposta analítica é uma das principais preocupações, pois os agentes de segurança pública desejam saber rapidamente se o produto apreendido contém alguma substância ilícita [1]. Esta preocupação assume uma maior relevância quando as análises necessitam ser realizadas no local onde os peritos policiais realizam operações de combate ao tráfico.

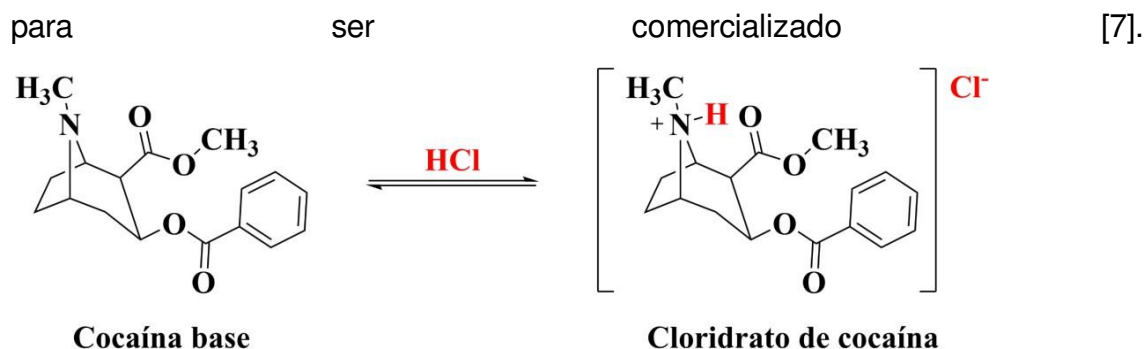
A classificação das drogas quanto ao tipo de efeito que causa no Sistema Nervoso Central (SNC) inclui: estimulantes, depressoras e perturbadoras [2]. As drogas psicoativas podem ser definidas como qualquer substância, natural ou sintética, que é absorvida pelo organismo humano e causa alterações no SNC, afetando o equilíbrio e provocando reações que variam de apatia à agressividade [3].

Devido à alta variabilidade de aparência física das drogas, é inviável a identificação visual como prova científica nos laudos. Diante desse cenário, as investigações forenses *in loco* tornam-se extremamente relevantes para aumentar a rapidez e a eficácia do sistema de justiça penal, reduzindo minimizando os atrasos naturais que ocorrem quando as provas demoram a ser enviadas e analisadas pelos laboratórios forenses [4].

A cocaína é um alcaloide extraído da *Erythroxylon coca*, planta comum na região dos Andes, e é uma das drogas ilícitas mais consumidas no mundo. De acordo com o Relatório Mundial sobre Drogas 2022, publicado pelo UNODC (United Nations Office on Drugs and Crime), os principais países produtores de cocaína são Bolívia, Colômbia e Peru [5]. O Brasil, embora não seja um dos maiores produtores, é o país onde a cocaína é apontada como uma das drogas ilícitas mais consumidas pela população, devido à sua fácil acessibilidade nas ruas [6].

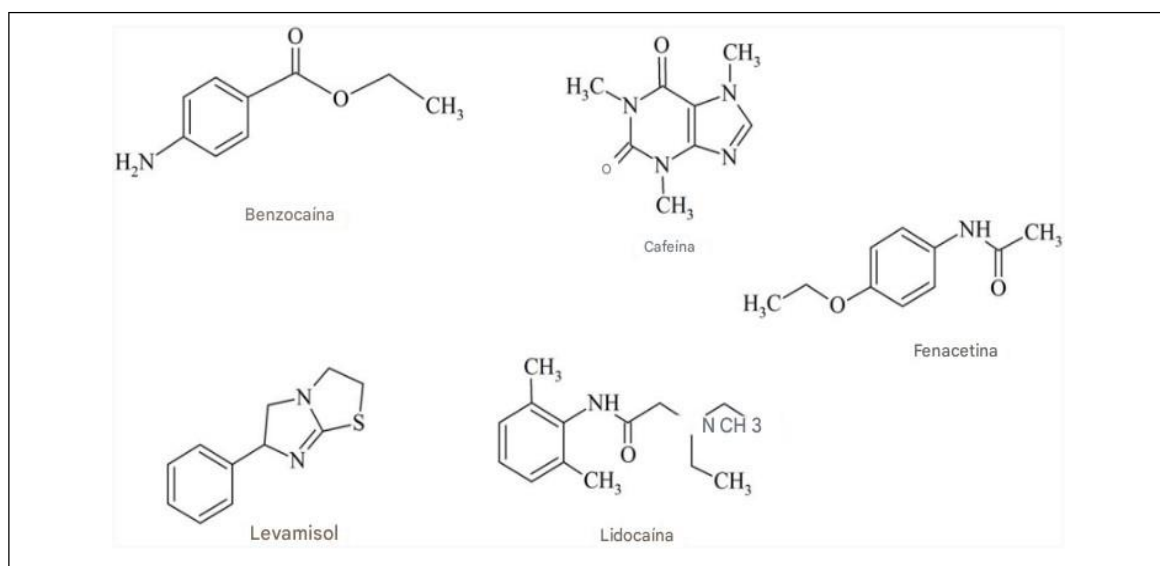
A cocaína é geralmente traficada em duas formas: pasta base e cloridrato (pó branco) cujas estruturas químicas podem ser observadas na Figura 1.

Para se obter a forma cloridrato, a pasta base é tratada com éter, acetona e ácido clorídrico. A reação resulta em uma droga com pureza em torno de 90%, um teor elevado. Devido a sua extrema pureza, o sólido é diluído



**Figura 1.** Estrutura da cocaína em equilíbrio ácido-base, formando o cloridrato de cocaína.

O produto comercializado pode conter substâncias diluentes que têm o objetivo de aumentar a droga e, conseqüentemente, o lucro do traficante. Os principais diluentes encontrados nas formas de sal ou base são: carbonato de cálcio, bicarbonato de sódio, açúcares, amido e talco. Também são utilizados adulterantes, que são substâncias que imitam ou potencializam os efeitos da cocaína. Os mais comuns são a cafeína, benzocaína, lidocaína, fenacetina e levamisol, cujas fórmulas químicas são mostradas na Figura 2 [8].



**Figura 2.** Adulterantes mais comuns para imitar ou potencializar os efeitos da cocaína.

Os testes rápidos clássicos de mudanças de cor de Dragendorff, Marquis, Mandelin, Mecke e Froeh são subjetivos e não permitem a obtenção de resultados definitivos. Com o avanço da ciência, desenvolveu-se o teste de Scott introduzido no ano de 1973 e aprimorado por Fasanello e Higgins em

1986 [9]. O teste é constituído por uma modificação do teste do tiocianato de cobalto, que fornece resultados falso positivo para cocaína, mas também para uma série de outras substâncias (lidocaína, procaína, fenciclidina, tetracaína e benzocaína) [9], sendo, portanto, pouco seletivo. O teste é realizado em três etapas: I) adição de solução de tiocianato de cobalto a uma amostra suspeita; II) adição de ácido clorídrico concentrado; III) adição de clorofórmio. Na presença de cocaína, há a formação de um precipitado azul na primeira etapa, correspondente ao complexo insolúvel de cobalto II e cocaína. Na segunda etapa, o precipitado é solubilizado, resultando em uma solução límpida de coloração rosa. Na terceira e última etapa, a adição de clorofórmio resulta na formação de uma segunda fase, orgânica, de coloração azul, confirmando que a amostra contém cocaína. Na ausência da droga, a fase orgânica não apresenta cor [10].

Devido à carência de ferramentas que facilitem a identificação do material apreendido com boa seletividade no local onde o material suspeito é apreendido, técnicas analíticas como cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC), cromatografia gasosa (GC), juntamente com detecção de matriz de diodos (GC-DAD), detecção de ionização de chama (GC-FID), espectrometria de massa (GC-MS) e ressonância magnética nuclear (RMN) têm sido aplicadas. As desvantagens dessas técnicas estão relacionadas ao preparo da amostra, ao tempo de análise e à natureza destrutiva da análise, além de serem caras e operarem em laboratório, longe do local da apreensão. Assim, os resultados são fornecidos após longos intervalos de tempo, o que as torna inviáveis para avaliação imediata do material no local [11,12].

As técnicas espectroscópicas NIR (infravermelho próximo), MIR (infravermelho médio) e Raman são todas fundamentadas na espectroscopia vibracional, o que permite a obtenção de informações detalhadas sobre a estrutura de substâncias moleculares complexas e sobre a composição de amostras. Essas técnicas são amplamente reconhecidas pela capacidade de fornecer informações qualitativas e quantitativas, tornando-se ferramentas valiosas para diversas aplicações, como no desenvolvimento de métodos analíticos aplicados as amostras complexas.

A espectroscopia de infravermelho próximo (NIRS) é um tipo de espectroscopia vibracional que emprega a faixa de comprimento de onda de

750 a 2500 nm [13]. A radiação eletromagnética NIR foi relatada pela primeira vez em 1800 por William Herschel [8], que nomeou a radiação de "raios caloríficos". Ao analisar o aumento de temperatura de um termômetro de bulbo enegrecido, posicionado além da extremidade vermelha do espectro visível projetado da luz solar dispersada por um prisma, Herschel detectou a radiação NIR.

No decorrer dos anos, espectros NIR foram obtidos para diversos tipos de substâncias e amostras, porém devido à sua complexidade, as informações analíticas que poderiam ser obtidas do NIR foram negligenciadas até meados da década de 1960. Com o avanço das técnicas de análise de dados multivariadas na década de 1970, o uso analítico do NIR tornou-se mais frequente, sendo utilizado em conjunto com a quimiometria [8]. A radiação NIR é eficiente para análise de amostras devido à sua capacidade de interagir com os modos vibracionais das ligações químicas presentes nas moléculas, identificando composições químicas e detectando adulterações.

A espectroscopia de infravermelho próximo gera métodos analíticos rápidos e não invasivos, sendo de aplicação quase universal para moléculas contendo ligações CH, NH, SH ou OH [13,14]. Além disso, o preparo da amostra é mínimo. Existem relatos de suas aplicações em diversas áreas, como agricultura, química de polímeros, indústria têxtil, cosmética e clínica [15,16]. Sua principal desvantagem é a dificuldade em atribuir grupos químicos, devido à presença de bandas de absorção largas, sobrepostas e fracas nos espectros [14].

Os espectrômetros NIR incluem basicamente uma fonte de luz, um seletor de comprimento de onda, um detector de amostras, um detector óptico e um sistema de processamento/análise de dados. Esses componentes podem ter propriedades diferentes e devem ser selecionados com base na sua utilização prevista, de modo a obter um instrumento eficaz [17]. Assim, torna-se possível se obter informações sobre as características moleculares das amostras, por meio da interação da radiação eletromagnética com as ligações químicas das substâncias presentes na amostra e sua absorção. A absorção da radiação NIR, estimula transições energéticas vibracionais nas ligações químicas entre os átomos, resultando na obtenção de espectros distintos para cada tipo de amostra. Os espectros são gerados pela absorção da energia da

radiação NIR que é convertida em energia vibracional, refletindo os diferentes movimentos dos átomos ligados formando os compostos químicos [18].

Correia e outros [19], em 1998, construíram um dos primeiros espectrômetros de infravermelho próximo (NIR) portátil capaz de acessar 32 comprimentos de onda, com uma fonte de radiação de diodo emissor de luz (LED). Recentemente, equipamentos portáteis foram disponibilizados comercialmente apresentando características necessárias para atuarem no âmbito da química forense. O desenvolvimento de micro-espectrômetros portáteis operando na região do infravermelho próximo possibilitou o monitoramento, caracterização e identificação de produtos, além de reduzir o tempo e o custo de análises em indústrias farmacêuticas e alimentícias, por exemplo. Na área forense, instrumentos compactos e portáteis foram utilizados para a determinação e classificação de diferentes drogas psicoativas [19], controle de qualidade de diversos tipos de combustíveis (diesel/biodiesel, gasolina/etanol, gasolina/aditivos) [21,22], plásticos [24] e para a classificação de vários tipos de medicamentos [24]. Em geral, modelos quimiométricos têm sido usados em conjunto com dados obtidos com microNIR para obter dados qualitativos e quantitativos, permitindo a construção de modelos para determinar a conformidade de produtos comerciais [19].

A maior parte desses instrumentos utiliza matrizes de sensores, enquanto outros recorrem a dispositivos MEMS (sistemas microeletromecânicos) como elementos intermediários espectrais. Esses dispositivos incluem fontes de radiação, baterias, controles eletrônicos e monitores, permitindo que o conjunto opere de forma autônoma [13]. Os instrumentos necessitam de uma cuidadosa avaliação para determinar sua estabilidade e reprodutibilidade, sendo fundamental verificar sua padronização.

A relação sinal-ruído pode ser otimizada neste tipo de equipamento mantendo o tempo de integração na faixa de algumas dezenas de milissegundos por varredura, o que é estabelecido por software. Médias de varreduras complementam os esforços para maximizar a relação sinal-ruído dos espectros. Um microcomputador pode ser usado para enviar os comandos ao espectrofotômetro e receber os dados espectrais coletados, por meio de uma porta USB com fio ou via conexão sem fio Bluetooth [13].

Uma desvantagem dos espectrofotômetros miniaturizados refere-se à representatividade dos espectros obtidos. A área de sondagem desses instrumentos geralmente é muito pequena (0,05 mm<sup>2</sup> para um instrumento NanoNIR produzido pela Texas Instruments e 20 mm<sup>2</sup> para outros instrumentos).

Para amostras não homogêneas, isso pode causar problemas de representatividade, deteriorando os resultados analíticos. A qualidade dos resultados obtidos com uso de instrumentos portáteis não deve ser avaliada apenas por comparação com resultados analíticos obtidos com uso de métodos de referência, ou métodos que utilizam instrumentos de bancada. A adequação dos resultados à finalidade da análise é crucial para decidir sobre a utilidade do método empregado, considerando os resultados em tempo real e a precisão, favorecendo um método menos preciso, onde os resultados podem ainda alcançar uma significância comparável aos de instrumentos NIR de bancada [1].

O avanço tecnológico tem gerado uma alta demanda por computadores cada vez mais potentes. Tanto a quimiometria quanto a tecnologia NIR evoluíram a tal ponto que a espectroscopia NIR agora permite obter modelos de identificação e quantificação mais robustos, ampliando sua aplicação e desafiando a quimiometria, motivando o aprimoramento de suas técnicas [18].

A quimiometria, por sua vez, é a utilização de técnicas matemáticas e estatísticas para obter informações de dados analíticos complexos [18], ou seja, métodos apropriados para a obtenção de informações importantes, do ponto de vista químico, a partir de um conjunto de dados experimentais [24]. É relevante observar que um conjunto de dados espectrais NIR normalmente passa por algum tipo de pré-tratamento antes de ser usado para fins qualitativos ou quantitativos. O objetivo do pré-tratamento é evitar problemas associados a fontes de variabilidade espectrais causadas por fatores físicos não informativos sobre as propriedades químicas de uma amostra. A principal fonte deste tipo de variabilidade provém do espalhamento da radiação por amostras sólidas pulverizadas [18]. Problemas de linha de base, por exemplo, podem ser corrigidos por meio da derivação do espectro. A primeira derivada é utilizada quando o espectro inteiro está deslocado por uma quantidade constante, enquanto a segunda derivada é empregada para corrigir inclinações

na linha de base (bias), especialmente à medida que o número de onda diminui [25].

Existem muitas ferramentas quimiométricas empregadas para extrair informações analíticas espectroscópicas NIR. Técnicas de classificação incluem o SIMCA (Software Independent Modeling of Class Analogy), a técnica mais empregada para análise qualitativa [18] e que é baseada em análise de componentes principais (PCA). Outras técnicas de classificação bastante utilizadas são a análise discriminante linear (LDA) e a análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLSDA).

SIMCA é muito empregada em problemas de classe única e deve ser a opção quando não se pode distinguir um número limitado de classes em um determinado conjunto de amostras. Assim, por exemplo, neste trabalho deve-se definir uma classe das amostras que contém cocaína em qualquer uma das suas formas químicas. Um modelo PCA é desenvolvido empregando-se os espectros pré-tratados das amostras que foram analisadas por métodos convencionais e que acusaram a presença de cocaína. O modelo permite acessar o espaço de componentes principais que capturam as características espectrais da classe. Limites estatísticos são estabelecidos para dois parâmetros relevantes que avaliam a similaridade de uma amostra analisada com os membros da classe. Estes limites são usualmente estabelecidos com grau de confiança estatístico de 95%. Uma amostra desconhecida é projetada neste modelo e seu espectro pode ser reconstituído empregando-se o número de componentes principais relevantes (que capturam a parte significativa da informação). Duas grandezas, ou critérios, são empregados no processo de decisão sobre a amostra pertencer ou não a classe. O primeiro refere-se ao resíduo global calculado entre o espectro reconstituído com uso do modelo PCA e o espectro experimental ( $S_i$ ). Resíduos altos indicam que a amostra analisada não apresenta as mesmas características daquelas empregadas na elaboração do modelo PCA. O segundo critério refere-se a medida da distância da amostra projetada no modelo ao seu centro, denominada de leverage ( $h_i$ ). Altos valores de  $h_i$  revelam que a amostra se afasta significativamente da população que define a classe. Os valores de  $S_i$  e  $h_i$  são calculados para a amostra analisada e se eles se mantiverem dentro dos limites da classe previamente determinados a amostra é classificada como pertencente à classe.

A Figura 3 mostra esquematicamente como se dá o processo de classificação empregando-se modelos PCA e SIMCA. No exemplo, dois componentes principais foram determinados como necessários para descrever a maior parte da variabilidade espectral das amostras associadas à classe.

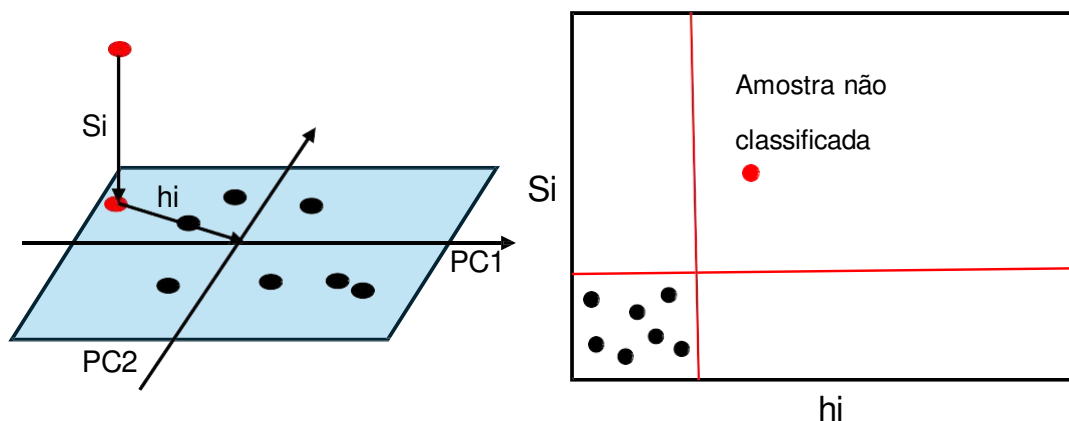


Figura 3. Classificação de amostras em uma única classe baseada em SIMCA e PCA.

Modelos de regressão empregam comumente a técnica de regressão linear múltipla, regressão de componentes principais (PCR) ou regressão de mínimos quadrados parciais (PLS) no desenvolvimento de métodos quantitativos baseados em dados multivariados. Todos esses métodos quantitativos pressupõem uma relação linear entre os dados espectrais e a concentração ou outro valor de propriedade a ser determinado, PCR e PLSR são técnicas de calibração consideradas padrão em espectroscopia NIR [12,18]. A regressão por mínimos quadrados parciais (PLSR) é normalmente utilizada para ajustar uma correlação linear entre os dados espectrais e as concentrações ou propriedades quantitativas das amostras [12].

Em suma, os modelos quimiométricos têm sido amplamente usados em conjunto com a espectroscopia NIR empregando instrumentos portáteis, possibilitando a construção de modelos para determinar a qualidade de produtos comerciais, sua origem e atendimento a especificações oficiais [19].

## **2. Objetivos**

### **Objetivo geral**

Avaliar a utilização de espectrômetros NIR portáteis e de baixo custo para a identificação e quantificação no local de cocaína em amostras apreendidas nas ruas por agentes da lei.

### **Objetivo específicos**

- Construir bibliotecas abrangentes de espectros NIR de amostras de cocaína apreendidas nas ruas empregando dois tipos de instrumentos NIR compactos.
- Analisar qualitativamente os dados espectrais dos dois conjuntos de amostras empregando análise de componentes principais (PCA).
- Avaliar o desempenho da classificação SIMCA na identificação da presença de cocaína em amostras e distinção da sua forma química.
- Construir e validar modelos de regressão visando quantificar o teor de cocaína nas amostras de rua.

### **3. Parte Experimental**

#### **3.1. Amostras**

Foi utilizado um conjunto de 423 amostras de cocaína apreendidas (Anexo 1) para calibração dos modelos de classificação e de regressão, apreendidas em condições de micro tráfico nos estados de Mato Grosso, Paraná, São Paulo e Pernambuco e já analisadas pela Polícia Federal Brasileira. Essas amostras tiveram suas composições identificadas e quantificadas por GC-MS, MIR ou Raman. Alguns constituintes químicos foram identificados pelo Laboratório de Química Forense do Instituto Nacional de Criminalística de Brasília. O conjunto amostral apresenta alta variabilidade de composição, sendo representativo das amostras apreendidas na venda de rua pelas polícias estaduais nos anos de 2020 a 2022, sendo 187 amostras contendo cloridrato de cocaína, 222 amostras contendo cocaína base e 14 não contendo cocaína.

Um segundo conjunto independente constituído por 95 amostras de cocaína apreendidas (Anexo 2) durante o ano de 2021 no estado de Pernambuco foi empregado para validar os modelos construídos.

Espectros obtidos de 45 amostras (Anexo 3) de adulterantes, diluentes e medicamentos, frequentemente encontradas na maioria das amostras de cocaína apreendidas (tais como talco, amido, lactose, cafeína, aminopirina e procaína), bem como de alguns antioxidantes utilizados na fabricação de outros medicamentos (IRGANOX, IRGANOX 1010, IRGANOX 1076), foram empregados como amostras negativas verdadeiras para cocaína permitindo a verificação do desempenho dos modelos de classificação. Na tabela 1 é possível visualizar análise de amostras utilizando os espectrômetros NeoSpectra e Texas.

#### **3.2. Descrição dos espectrofotômetros portáteis NIR**

Foram utilizados dois espectrofotômetros ao longo deste estudo: o NanoNIR (Texas Instruments Inc.) e o NeoSpectra (Si-Ware, Egito). Estes instrumentos são portáteis e compactos, sendo capazes de monitorar as faixas espectrais do infravermelho próximo de 900–1700 nm e de 1350–2550 nm, respectivamente, com resolução nominal de 10 nm.

**Tabela 1.** Apresenta a análise de amostras utilizando os espectrômetros NeoSpectra e Texas. Inclui o número total de amostras testadas, a presença de adulterantes e diluentes, bem como os resultados de modelos de classificação SIMCA e PLS para diferentes formas de cocaína (HCl e base). Além disso, são destacados os conjuntos de validação cruzada e externa, especificando a distribuição das amostras para cada modelo.

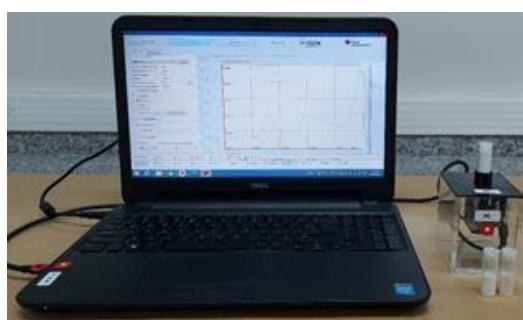
<b>Categoria</b>	<b>NeoSpectra</b>	<b>Texas</b>
<b>Amostras utilizadas</b>	423	423
<b>Adulterantes/diluentes/medicamentos</b>	45	45
<b>Conjunto independente</b>	95	95
<b>SIMCA modelo global</b>	135 amostras de validação (36 negativas e 87 positivas)	135 amostras de validação (36 negativas e 87 positivas)
<b>SIMCA HCl e BASE</b>	47 contêm cocaína na forma HCl e 22 contêm cocaína na forma básica.	
<b>PLS modelo global</b>	375 validação cruzada e 68 amostras para validação externa.	396 validação cruzada e 61 amostras para validação externa.
<b>PLS modelo base</b>	210 validação cruzada e 22 amostras para validação externa.	22 validação externa
<b>PLS modelo HCl</b>	176 validação cruzada e 46 amostras para validação externa	39 validação externa
<b>PLS amostras de Pernambuco</b>	93 validação cruzada e 68 amostras para validação externa	

O NanoNIR contém duas pequenas fontes de radiação de filamento de tungstênio (0,7 W) incorporadas ao equipamento, próximas à sua janela de medição. A radiação NIR que retorna da amostra, em uma medição de reflexão difusa, passa por uma fenda de entrada e é direcionada para uma grade de

difração fixa que projeta a radiação dispersa na superfície de um dispositivo MEMS constituído por um arranjo bidimensional de microespelhos (1024 x 256). Colunas deste arranjo têm seu ângulo alterado eletronicamente, enviado sequencialmente a radiação de diferentes comprimentos de onda para um detector de InGaAs o qual registra as intensidades gerando as informações necessárias para a obtenção dos espectros.

Por sua vez, o NeoSpectra é composto por uma unidade de iluminação contendo três fontes de filamento de tungstênio e sistema óptico de acoplamento, projetado para medições por reflexão. O instrumento é baseado em um interferômetro Michelson completo implementado em um chip MEMS. O fabricante informa uma relação sinal-ruído de 5,000 no comprimento de onda de 1250 nm. Os dispositivos foram alojados em uma caixa impressa em 3D, com uma abertura e um suporte para o frasco contendo a amostra, posicionados sobre a janela do espectrofotômetro.

Os instrumentos foram conectados à porta USB de um notebook (Dell Technologies, 16 GB DDR4, SSD de 512 GB) e ligados por 30 minutos permitindo a sua estabilização antes de iniciar as medições; a fonte de radiação foi acionada apenas durante a aquisição dos espectros, como observado na figura 4.



NeoSpectra micro-FT-NIR (Si-ware)  
US\$ 5000  
1350 – 2500 nm



NanoNIR (Texas Instruments)  
US\$ 1000  
900 – 1700 nm

**Figura 4.** Sistema para análise de cocaína. (A) Neospectra; (B) NanoNIR.

Os espectros foram adquiridos com um tempo de integração de 0,6 segundos, média de 25 varreduras e 228 pontos registrados na faixa de 900–1700 nm empregando-se o NanoNIR, e média de 25 varreduras e 256 pontos na faixa de 1350–2550 nm para o NeoSpectra.

Os espectros das amostras apreendidas foram obtidos à temperatura ambiente do laboratório ( $25 \pm 1^\circ\text{C}$ ) por um período de sete dias no Laboratório de Química Forense do Instituto Nacional de Criminalística.

### **3.3. Protocolo de medição das amostras**

As amostras foram colocadas em frascos de vidro cilíndrico de 4 mL, com fundo plano e 1,2 cm de diâmetro interno, de forma a produzir uma camada com espessura superior a 5 mm. O frasco foi tampado e inserido no suporte de medida para obtenção dos espectros. Um frasco contendo Spectralon (referência correspondente a 100% de reflexão da radiação NIR) foi utilizado para medições de fundo espectral necessárias para o cálculo dos espectros de reflectância, repetidas a cada dez varreduras das amostras. As amostras foram medidas em duplicata, obtendo-se um espectro médio representativo com uma relação sinal-ruído aprimorada.

### **3.4. Processamento dos dados e análise quimiométrica**

Os conjuntos de dados espectrais adquiridos foram processados utilizando o software Unscrambler 10,5 (Aspen Technologies, EUA). Os espectros foram pré-tratados com a segunda derivada por meio do algoritmo Savitzky-Golay, com uma janela de 9 pontos e polinômio de ajuste de 2º grau, para minimizar principalmente os efeitos de espalhamento, mantendo as informações espectrais relevantes associadas à composição das amostras.

Em seguida, foi realizada a Análise de Componentes Principais (PCA) sobre o conjunto de dados pré-processados, seguida de modelos de classificação (SIMCA). Modelos de regressão (PLS) foram construídos para estimar os teores de cocaína presente nas amostras.

A validação dos modelos de classificação foi realizada utilizando as seguintes métricas: Taxa de Falso Positivo (FPR), Taxa de Falso Negativo (FNR), Taxa de Seletividade (STR), Taxa de Especificidade (SPR) e Taxa de

Eficiência (EFR). Essas métricas foram calculadas por meio das equações abaixo:

Taxa de Falso Positivo (FPR)

$$FPR = [FP / (FP + TN)] \times 100$$

Mede a proporção de falsos positivos em relação ao total de negativos. Indica a probabilidade de um item negativo ser classificado como positivo.

Taxa de Falso Negativo (FNR)

$$FNR = [FN / (FN + TP)] \times 100$$

Mede a proporção de falsos negativos em relação ao total de positivos. Representa a probabilidade de falhar ao identificar um item positivo.

Taxa de Seletividade (STR)

$$STR = [TP / (TP + FN)] \times 100$$

Representa a capacidade do modelo em identificar corretamente os positivos.

Taxa de Especificidade (SPR)

$$SPR = (TN / (TN + FP)) \times 100$$

Mede a capacidade do modelo de identificar corretamente os negativos.

Taxa de Eficiência (EFR)

Combina a taxa de falsos positivos e falsos negativos para medir a eficiência geral do modelo. Quanto menor o FPR e o FNR, maior serão a eficiência.

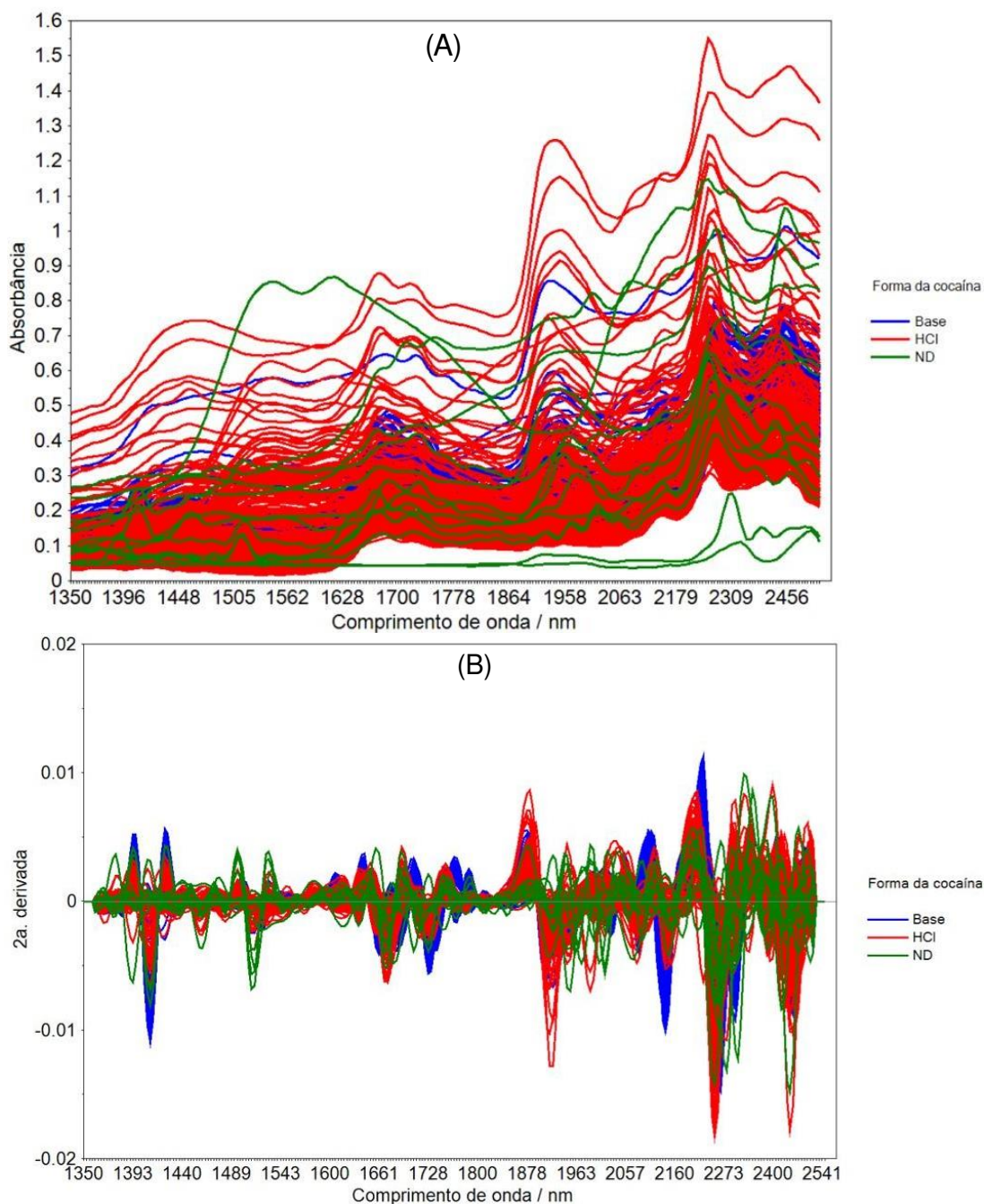
$$EFR = 100 - (FPR + FNR)$$

Nesta abordagem, os parâmetros utilizados incluem Verdadeiros Positivos (TP), Falsos Positivos (FP), Verdadeiros Negativos (TN) e Falsos Negativos (FN), os quais são fundamentais para avaliar o desempenho dos modelos de classificação.

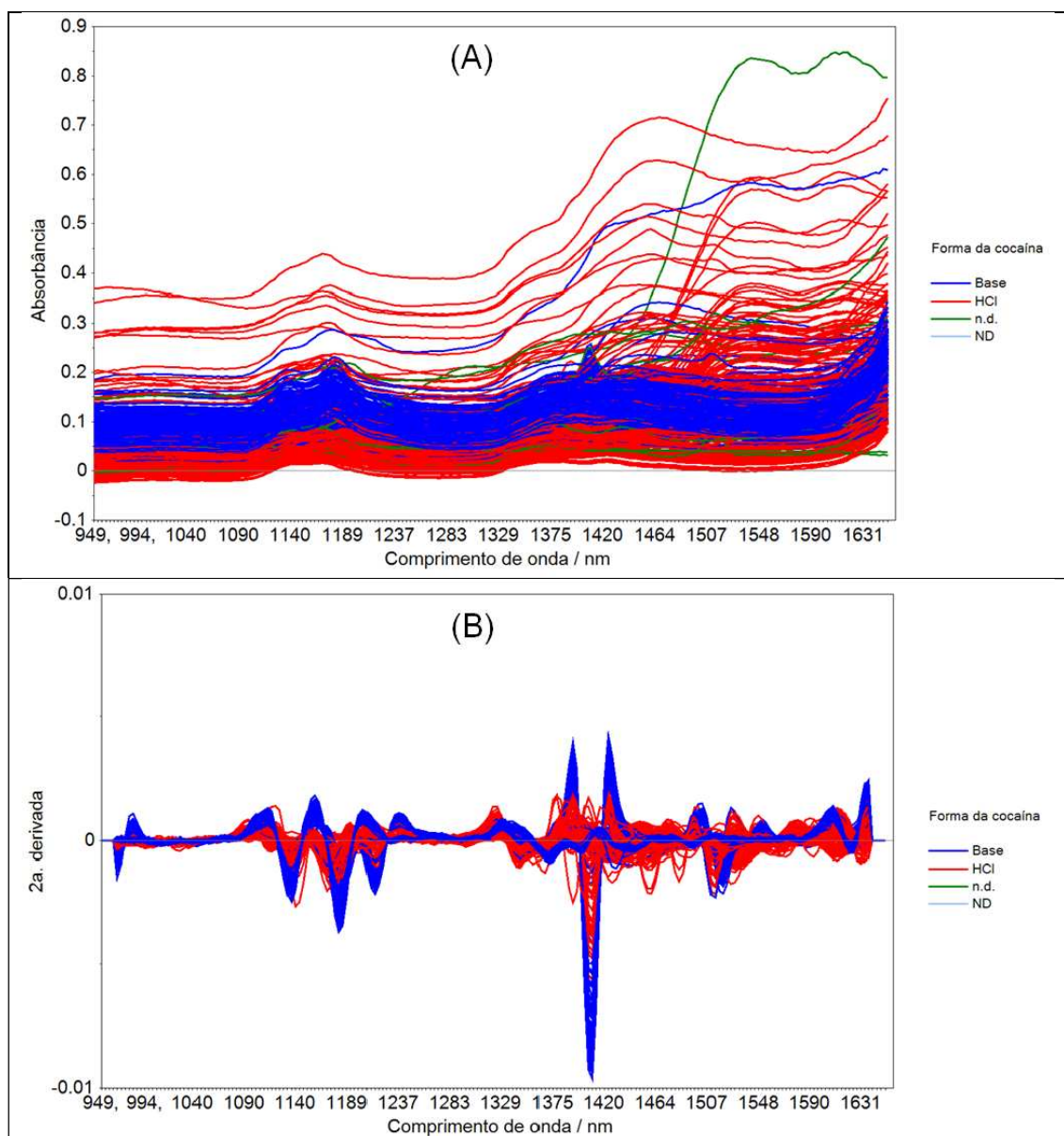
## 4. Resultados e discussão

### 4.1. Características dos espectros de infravermelho próximo de cocaína

Os espectros brutos referentes às médias das duplicatas das amostras de cocaína obtidos com os dois espectrômetros são apresentados nas Figuras 6 e 7 para o NeoSpectra e NanoNIR, respectivamente.



**Figura 6.** Espectros brutos das amostras de cocaína obtidos com o instrumento NeoSpectra classificados de acordo com a forma química da cocaína. (A), espectros originais; (B) segunda derivada dos espectros originais.



**Figura 7.** Espectros brutos das amostras de cocaína obtidos com o instrumento NanoNIR classificados de acordo com a forma química da cocaína. (A), espectros originais; (B) segunda derivada dos espectros originais.

Os espectros obtidos empregando-se o NanoNIR apresentaram ruído excessivo na faixa inicial e final de comprimento de onda e, assim, foram removidas, preservando-se somente a faixa de 950 – 1650 nm a qual foi submetida ao pré-tratamento por meio da 2ª, derivada e empregada no desenvolvimento dos modelos.

Os espectros obtidos com uso do NeoSpectra foram integralmente utilizados na faixa de comprimento de onda registrada por este equipamento.

Os espectros das amostras contendo cloridrato de cocaína estão

representadas em vermelho, as amostras contendo cocaína base em azul, e as que não contêm cocaína, em verde.

Como é possível observar nas Figuras 6A e 7A, os espectros das amostras que contêm cloridrato de cocaína apresentam maior variabilidade em comparação aos espectros de cocaína base. Este fato decorre principalmente do grau elevado de adulteração das amostras que contêm cloridrato de cocaína, tanto em termos de tipos de adulterantes, quanto aos níveis de adulteração.

Outra fonte de variabilidade nos espectros está relacionada às características físicas das amostras, principalmente àquelas relacionadas à sua granulometria, as quais devem ser minimizadas, pois não fornecem informações sobre a composição química das amostras. Caso esses espectros brutos fossem utilizados na construção dos modelos, as fontes de variabilidade que não trazem informações relevantes sobre a composição química das amostras seriam consideradas, comprometendo o desempenho dos modelos qualitativos e quantitativos.

Desta forma, os espectros originais foram pré-tratados por meio da 2ª, derivada que constitui uma forma efetiva de minimizar o efeito da variabilidade não-informativa. Tais fontes de variabilidade incluem alterações aditivas, que podem ocorrer devido a interferências externas, e mudanças na inclinação da linha de base espectral, que podem ser causadas por flutuações no equipamento ou no ambiente de medição. Os espectros derivados resultantes, realçam as informações relevantes referentes à composição química das amostras e minimizam as fontes de variabilidade não-informativas. Os espectros derivados podem ser observados nas Figuras 6B e 7B, para os espectros obtidos com o NeoSpectra e NanoNIR, respectivamente.

Para o NanoNIR, observa-se que as regiões entre 1100 e 1300 nm e entre 1400 e 1600 nm são de grande importância. Essas faixas espectrais correspondem aos sobretons das ligações C-H, N-H e O-H, que são características de muitas substâncias orgânicas, incluindo a cocaína, seus adulterantes e diluentes. Esses sobretons geram sinais de absorção que fornecem informações relacionadas à estrutura molecular das substâncias presentes na amostra. Como essas regiões estão fortemente associadas às características vibracionais específicas das ligações químicas, elas são

extremamente valiosas para a identificação das substâncias presentes nas amostras. Dessa forma, o NanoNIR fornece informações espectrais relevantes sobre a composição química das amostras analisadas.

Por outro lado, os espectros obtidos com o NeoSpectra apresentam algumas vantagens adicionais. Ao longo de sua faixa de trabalho, é possível observar uma série de regiões espectrais informativas, que abrangem não apenas os sobretons das ligações, mas também transições originadas a partir de combinações de modos vibracionais. Essa capacidade de capturar tanto sobretons quanto combinações oferece uma visão mais abrangente das características espectrais das amostras. Isso é particularmente vantajoso, pois permite uma análise mais detalhada e diferenciada das substâncias presentes, fornecendo informações cruciais para a identificação da cocaína e seus adulterantes. Além disso, a capacidade de capturar diferentes tipos de transições espectrais do NeoSpectra amplia as possibilidades de análise e torna esse instrumento mais versátil em comparação com outros instrumentos que operam em faixas espectrais mais limitadas.

Portanto, no geral, ambos os espectrofotômetros apresentam características que contribuem para o desenvolvimento de métodos analíticos com base nas informações espectrais por eles obtidas. Enquanto o NanoNIR é eficaz em identificar sobretons específicos dos modos vibracionais das ligações químicas, o NeoSpectra se destaca pela sua capacidade de capturar uma gama mais ampla de transições vibracionais, oferecendo informações mais abrangentes e úteis para o desenvolvimento de métodos analíticos quali-quantitativos.

#### **4.2. Análise de Componentes Principais (PCA) e classificação SIMCA: NeoSpectra**

Após realizar-se o pré-processamento dos dados espectrais, o próximo passo envolveu a realização de uma Análise de Componentes Principais (PCA) do conjunto de dados espectrais das amostras de cocaína. A PCA é uma técnica amplamente utilizada em análise multivariada. Ela visa reduzir a dimensionalidade dos dados, preservando a maior parte da informação neles presente. Para realizar essa análise, foi utilizado o método de decomposição em valores singulares (SVD), que é um algoritmo eficiente para decompor

grandes matrizes de dados em componentes principais que capturam sucessivamente a variabilidade do conjunto de dados multivariado.

A PCA do conjunto completo de espectros obtidos das amostras de cocaína de rua empregando o NeoSpectra mostra que 6 componentes principais (PC) são necessários para capturar 94,3% da informação presente no conjunto. A Figura 8A mostra a distribuição dos scores nas 1<sup>a</sup>, e 2<sup>a</sup>, PCs que, em conjunto, capturam 70,5% da variabilidade dos dados espectrais pré-processados. Nesta figura, é possível distinguir 4 grupos de amostras.

A Figura 8B apresenta a distribuição dos scores obtidos por espectroscopia no infravermelho próximo (NIR), classificados de acordo com a forma química da cocaína presente nas amostras analisadas. A distinção entre as duas principais formas químicas da substância – cloridrato de cocaína (HCl) e base - (forma HCl representada em vermelho e a base em azul). A diferenciação ocorre devido às diferenças estruturais e intermoleculares dessas espécies químicas: enquanto o cloridrato de cocaína é um sal altamente solúvel em água devido à presença do íon  $\text{Cl}^-$ , a cocaína base é apolar e apresenta baixa solubilidade em meios aquosos, sendo normalmente vaporizada para consumo.

Embora a maioria das amostras tenha sido corretamente agrupada conforme sua forma química, oito exceções foram detectadas. Essas amostras, identificadas como contendo cocaína na forma base pelo laboratório de criminalística, foram classificadas espectroscopicamente no grupo de amostras contendo HCl. Essa discrepância pode estar associada à presença residual de HCl na conversão para a forma base, à interferência de adulterantes polares ou a um processo de conversão incompleto da forma HCl para a base livre. Além disso, a interação da matriz com diluentes como lactose, amido ou carbonatos pode influenciar o perfil espectral, dificultando a correta discriminação química.

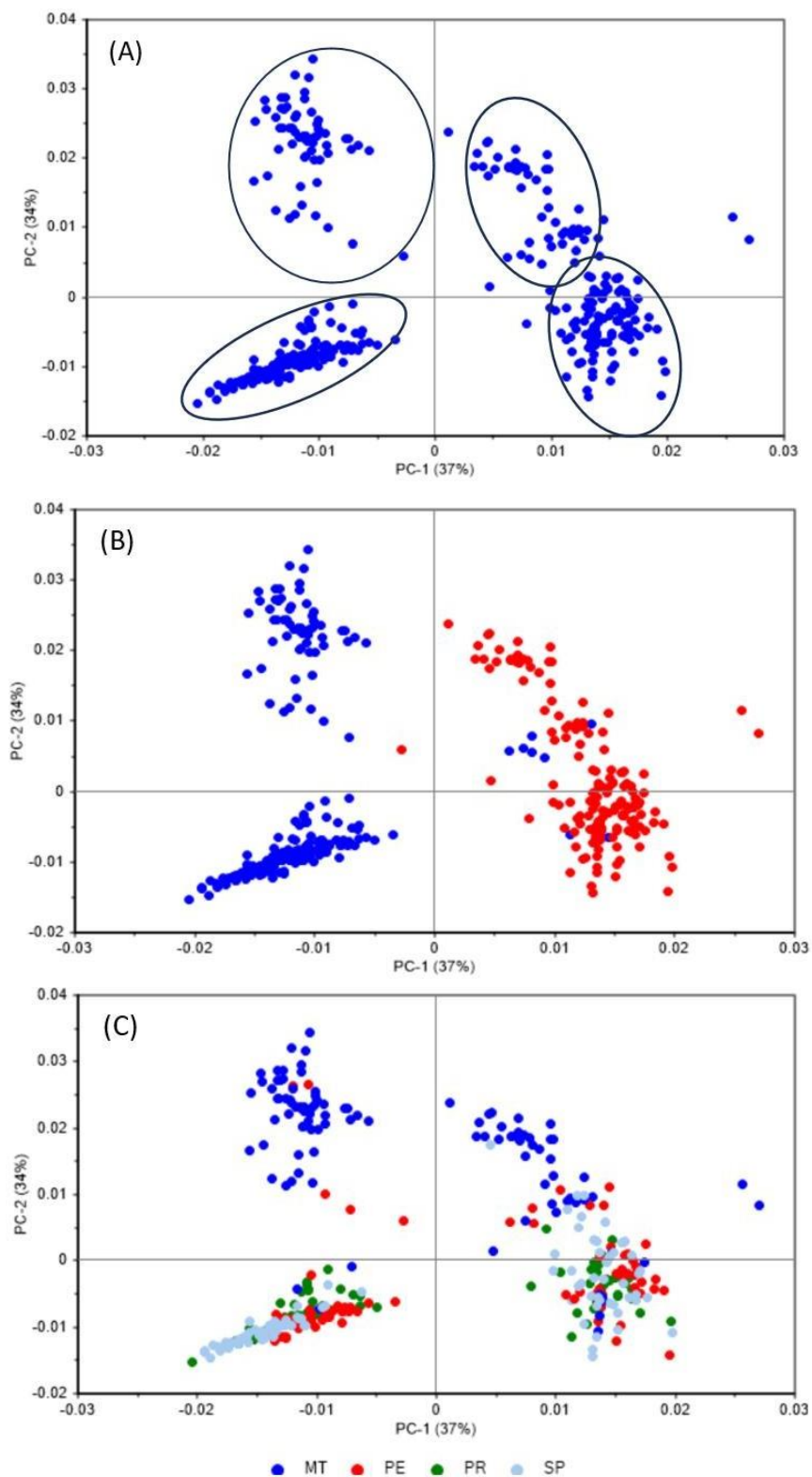
A Figura 8C destaca a diferenciação geográfica das amostras de cocaína com base em suas assinaturas espectrais. Observa-se uma distinção clara entre as amostras apreendidas no estado do Mato Grosso e aquelas apreendidas nos estados de São Paulo, Pernambuco e Paraná, independentemente da forma química da cocaína. Essa diferenciação sugere que a cocaína comercializada no Mato Grosso possui origem distinta das

demais, possivelmente devido a variações no processo de produção, na rota de tráfico ou no perfil de adulteração empregado.

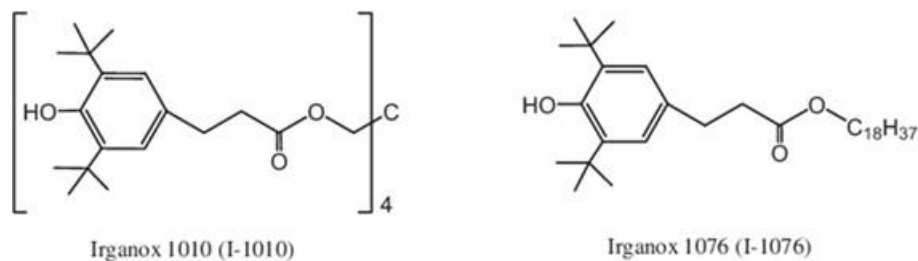
As amostras provenientes de São Paulo, Pernambuco e Paraná apresentam uma distribuição de scores mais homogênea, indicando composição química mais uniforme. Isso sugere a adição de adulterantes e diluentes em proporções semelhantes, o que pode refletir uma padronização nos processos de adulteração da droga. Substâncias como lidocaína (anestésico que potencializa o efeito da cocaína), cafeína (estimulante que intensifica a percepção dos efeitos da droga), levamisol (anti-helmíntico frequentemente associado ao aumento da toxicidade da cocaína) e fenacetina (analgésico utilizado para mascarar a pureza da substância) são adulterantes comuns e podem influenciar os espectros obtidos.

Dessa forma, os resultados evidenciam a aplicabilidade da espectroscopia NIR na diferenciação química da cocaína tanto em termos de forma estrutural (HCl vs. base livre) quanto de origem geográfica e composição.

A análise dos resultados de composição das amostras apreendidas no estado do Mato Grosso mostra que a maioria delas contém o composto irganox 1010 (pentaerythritol tetrakis(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyhydrocinnamate) predominantemente ou irganox 1076 3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl), empregados como diluentes e não encontrados nas amostras de outros estados. Observa-se na figura 9 suas formas químicas.



**Figura 8.** Distribuição dos scores nas duas primeiras PCs dos espectros das amostras de cocaína. (A) distribuição das amostras não classificadas; (B) distribuição classificada pela forma química da cocaína (azul – base, vermelho – HCl); (C) distribuição classificada pelo local (estado) na qual a droga foi apreendida.



**Figura 9.** Estrutura química dos compostos irganox 1010 e 1076, respectivamente.

As Figuras 10A-C permitem, como exemplo, comparar os espectros das duas formas de Irganox com os espectros das drogas apreendidas nos estados do Mato Grosso e do Paraná. O pico de absorvância em 1409,8 nm constitui uma evidência da presença de Irganox 1076 na maioria das amostras do Mato Grosso, enquanto as amostras do Paraná, São Paulo e Pernambuco não apresentam esse pico. Portanto, provavelmente, a presença deste composto permitiu a distinção das amostras apreendidas no Mato Grosso das amostras de outros estados.

O Irganox 1076 é um antioxidante amplamente utilizado em diferentes indústrias, principalmente na fabricação de plásticos, borrachas e outros materiais poliméricos. Este composto, conhecido também como 2,2'-methylene-bis(4-methyl-6-tert-butylphenol), é parte da classe dos antioxidantes fenólicos, e sua principal função é prevenir a degradação de materiais expostos à oxidação e ao calor, o que prolonga a durabilidade e a qualidade dos produtos finais. Além disso, o Irganox 1076 é empregado em diversas aplicações industriais devido à sua eficiência em inibir o processo de degradação causado pela exposição a radiação UV e oxigênio.

A presença do pico de absorvância específico em 1409,8 nm nas amostras do Mato Grosso serve como uma evidência robusta de que o Irganox 1076 está presente nessas substâncias. A ausência desse pico nas amostras dos estados de Paraná, São Paulo e Pernambuco sugere que esse composto pode ser utilizado como um marcador para diferenciar as amostras, permitindo identificar a origem das substâncias apreendidas. Esse tipo de análise espectroscópica é fundamental para rastrear produtos suspeitos e investigar

práticas ilegais, como o tráfico de substâncias adulteradas ou a contaminação de produtos.

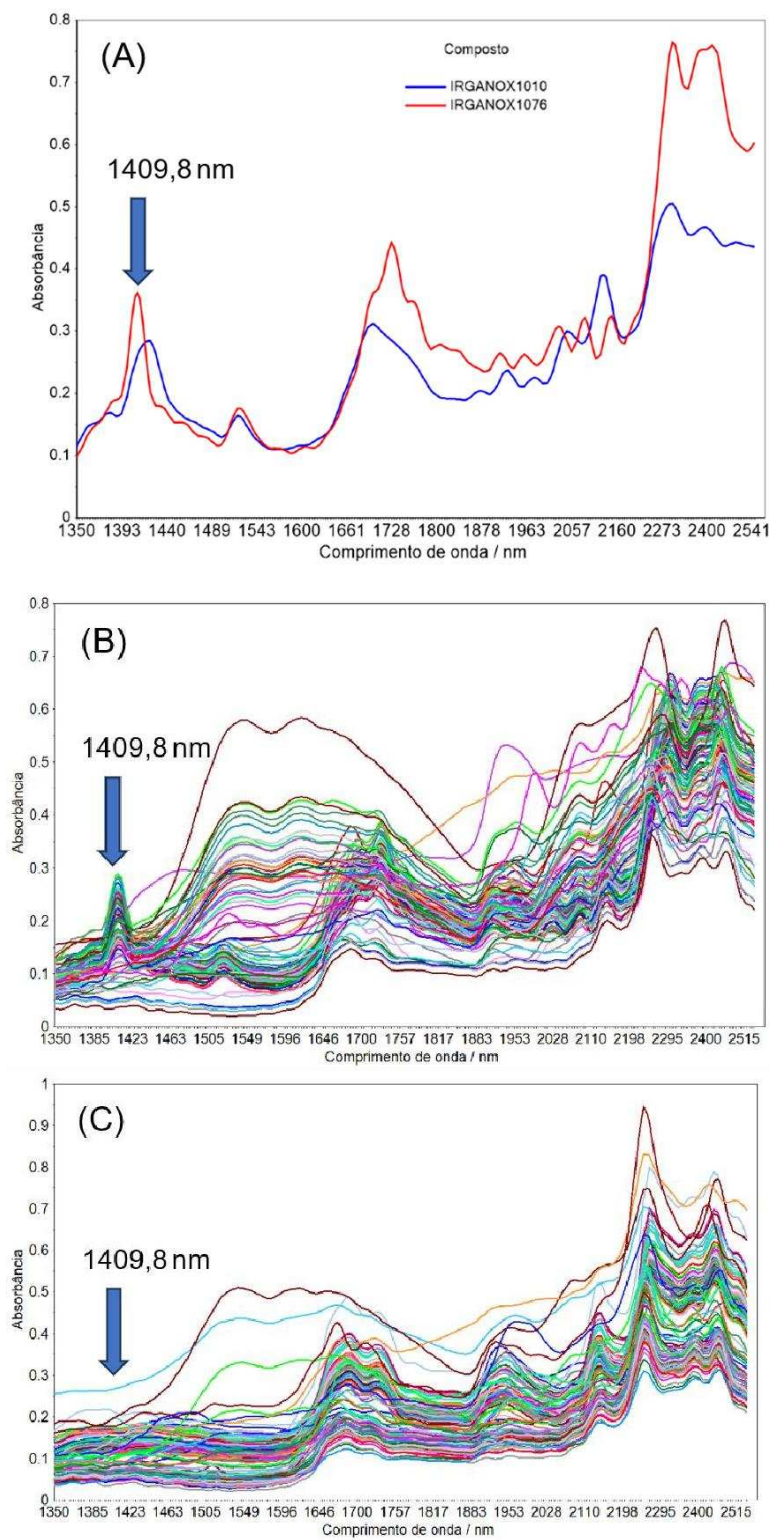
A utilização de espectroscopia para detectar compostos como o Irganox 1076 nas drogas apreendidas também pode indicar que esse antioxidante está sendo utilizado de maneira não convencional. Isso abre novas abordagens para investigações científicas e legais sobre a manipulação de substâncias. Dessa forma, o estudo das amostras apreendidas e a análise dos espectros oferecem uma ferramenta importante não apenas para a identificação de compostos químicos usuais, mas também para a detecção de aditivos e contaminantes, como o Irganox 1076, que podem revelar padrões de produção ou distribuição de produtos ilícitos.

Modelos PCA foram também construídos empregando-se as amostras das duas formas químicas de cocaína presentes nas amostras com o objetivo de verificar o desempenho da classificação baseada em SIMCA. Neste caso, as 8 amostras identificadas como sendo de cocaína base, mas que foram localizadas no grupo de scores da Figura 8A referente à cocaína na forma HCl, foram removidas para construção dos modelos PCA.

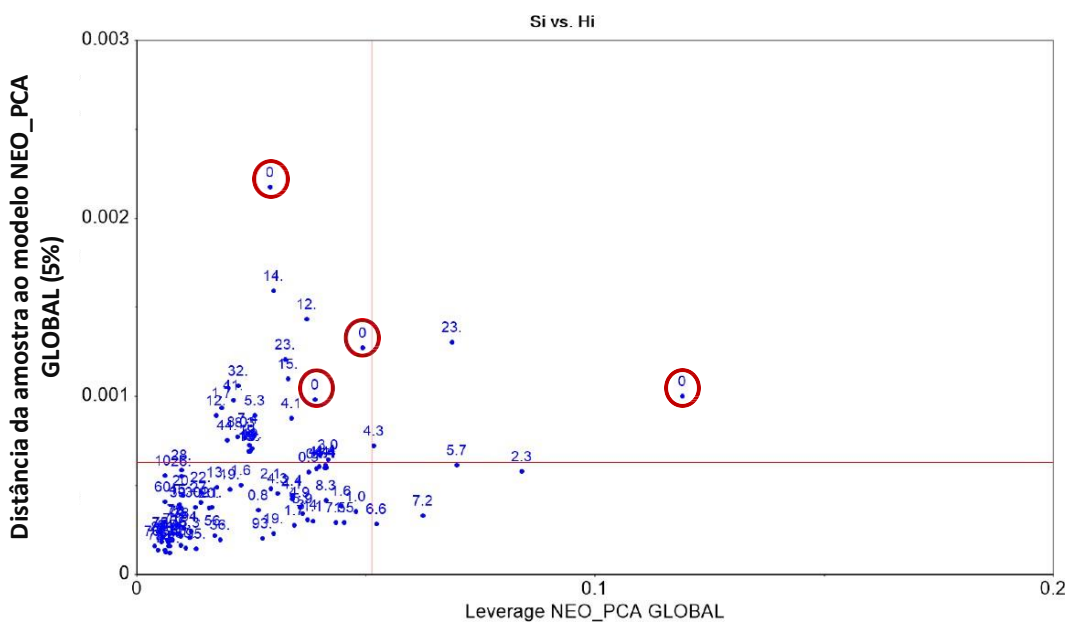
#### **4.3. Identificação da presença de cocaína e suas formas em amostras apreendidas empregando SIMCA: NeoSpectra modelo global**

O modelo PCA global construído com todas as amostras contendo cocaína em qualquer uma das suas formas e apreendidas nos quatro estados foi empregado na classificação das 135 amostras de validação (36 negativas e 87 positivas).

As figuras de mérito de classificação são mostradas na Tabela T2. A Figura 11 mostra o resultado da classificação com nível de confiança de 5% das 87 amostras apreendidas com os seus teores de cocaína dentre as quais 4 não continham cocaína conforme verificado pelas análises realizadas pelo Laboratório de Criminalística da Polícia Federal e foram corretamente classificadas, 17 amostras foram classificadas como falsos positivos. Destas, 10 continham cocaína em teores menores que 8%. Somente 1 amostra (fosfato de cálcio) foi classificada como falso positivo.



**Figura 10.** (A) Espectros NIR dos compostos irganox 1010 e 1076 puros; (B) espectros das amostras de cocaína apreendidas no estado do Mato Grosso; (C) espectros das amostras de cocaína apreendidas no estado do Paraná.



**Figura 11.** Resultados da validação da classificação SIMCA para o conjunto externo de 91 amostras apreendidas de cocaína. Os teores de cocaína nas amostras estão indicados. As quatro amostras corretamente não classificadas identificadas com círculos vermelhos não contêm cocaína.

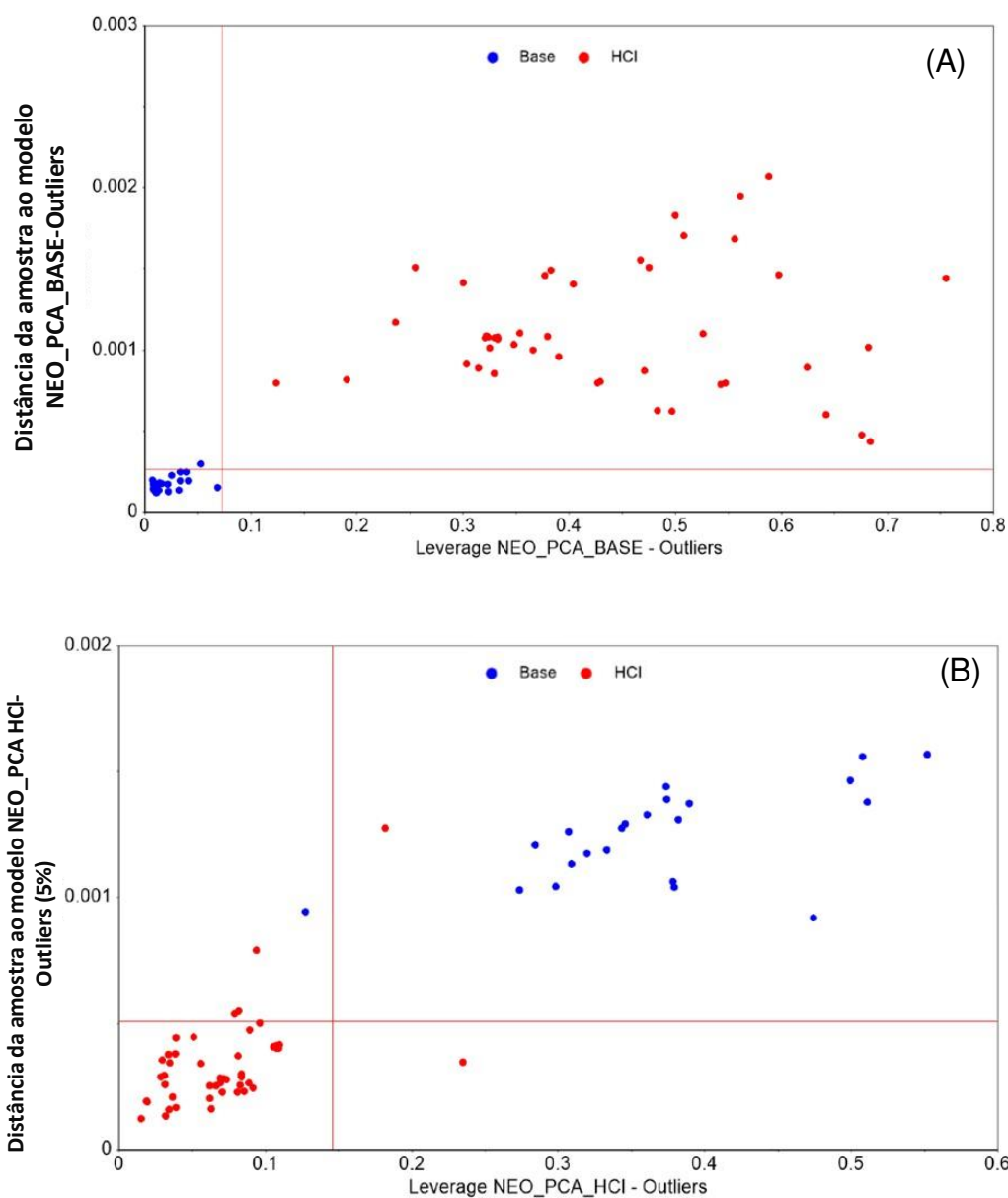
Após a classificação das amostras como contendo cocaína, a análise pode ser expandida empregando-se os modelos PCA construídos para as formas base e HCl. Assim, além de classificar as amostras em relação a presença da droga, a sua forma química pode ser determinada.

A Figura 12A-B mostra o resultado da classificação das 69 amostras do conjunto de validação externo que foram identificadas como contendo cocaína empregando-se o modelo global. Destas amostras, 47 contêm cocaína na forma HCl e 22 contêm cocaína na forma básica.

A Tabela 2 mostra as figuras de mérito de validação da classificação para as formas básica e HCl.

O desempenho do modelo global para presença de cocaína apresentou um desempenho apenas satisfatório com eficiência igual a 71,9%. Este desempenho se deve principalmente à grande dispersão dos espectros associados à presença da forma HCl nas amostras. A validação deste modelo global revelou uma alta taxa de falsos negativos, principalmente relacionados às amostras que continham a forma HCl de cocaína e em teores inferiores à 10% da droga. Para essas amostras as possibilidades de variação da

composição global são maiores, refletindo no desempenho da classificação. Ou seja, o modelo global, embora construído com um número significativo de amostras apreendidas na rua, não conseguiu obter abrangência suficiente para evitar a ocorrência de uma quantidade alta de falsos negativos.



**Figura 12.** Resultados de classificação quanto à forma química de amostras previamente identificadas como contendo cocaína. (A) amostras de validação contendo cocaína empregando-se o modelo PCA para a forma básica; (B) amostras de validação contendo cocaína empregando-se o modelo PCA para a forma HCl.

**Tabela 2.** Resultados de classificação SIMCA para validação dos modelos para cocaína, forma básica e forma HCl empregando-se os espectros obtidos com o NeoSpectra. Dados completos podem ser encontrados no Apêndice A1.

Modelo	FPR %	FNR %	STR %	SPR %	EFR %
Global	2,8	25,3	74,7	97,2	71,9
Base	0	0	100	100	100
HCl	7,0	14,9	85,1	93,1	78,1

O problema de abrangência dos modelos de classificação para amostras de cocaína apreendidas na rua expõe uma limitação dos métodos baseados em espectroscopia NIR. Os modelos devem ser construídos com amostras representativas que refletem a variabilidade de composição do presente e do futuro quando amostras apreendidas serão analisadas empregando-se estes modelos. Os fornecedores da droga de rua, por sua vez, alteram continuamente a sua composição, incorporando na sua formulação novos compostos, alterando significativamente a composição relativa da droga, de adulterantes e diluentes.

O número de amostras contendo cocaína corretamente classificadas empregando-se SIMCA e o modelo global somou 68 (22 contendo cocaína na forma base e 46 na forma HCl). Essas amostras foram empregadas na validação de modelos específicos para as formas base e HCl. Os resultados, neste caso, são muito melhores com eficiências de 100 e 78,1% para as formas base e HCl, respectivamente como pode ser observado na Figura 12 e na Tabela 2. Estes resultados corroboram a hipótese de que a variabilidade das amostras contendo a forma HCl é alta e não foi adequadamente contemplada no conjunto de calibração dos modelos PCA. O conjunto de validação incluiu novas composições de amostras que apresentaram esta forma de cocaína, resultando em um desempenho inferior.

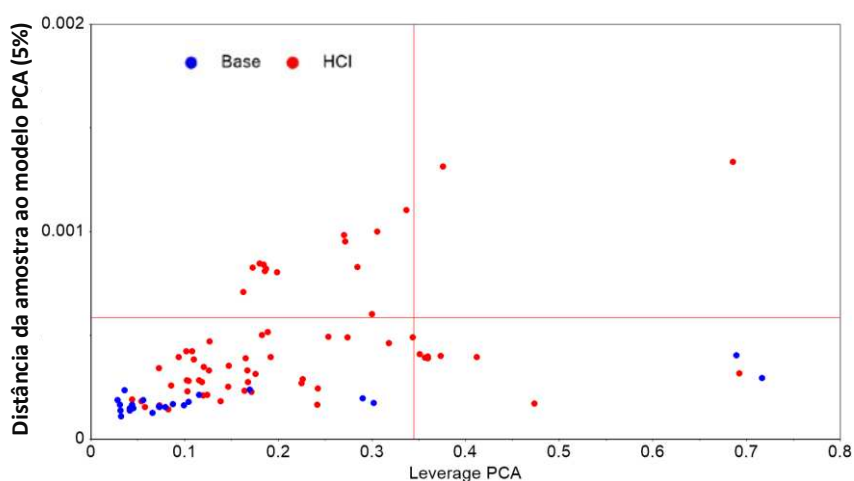
#### **4.4. Identificação da presença de cocaína e suas formas em amostras apreendidas empregando SIMCA: NeoSpectra modelo local (PE)**

As amostras do conjunto de validação externo empregadas neste trabalho foram todas apreendidas no estado de Pernambuco durante o ano de 2021. Portanto, foi verificado se um modelo local, empregando-se somente as amostras do conjunto de calibração também apreendidas em Pernambuco,

poderia oferecer um desempenho melhor em relação à classificação SIMCA de amostras positivas para cocaína e determinar a forma química da droga nessas amostras.

A Figura 13, mostra o resultado de classificação das amostras de validação empregando-se modelo local de Pernambuco para determinar a presença de cocaína em qualquer das suas duas formas químicas.

Os resultados de classificação das amostras de validação foram piores que aqueles obtidos com o modelo global sendo que 25 amostras foram detectadas como falsos negativos. Além disso, o número de amostras classificadas como falsos positivos aumentou de 2 para o modelo global para 3 empregando-se o modelo local. Desta forma, conclui-se que em termos de classificação, o uso de modelos locais não melhorou o desempenho da técnica NIR na classificação de amostras apreendidas de cocaína de rua.



**Figura 13.** Classificação das amostras de validação empregando-se o modelo PCA local construído com as amostras de calibração apreendidas somente em Pernambuco.

#### 4.5. Determinação do teor de cocaína empregando PLS: NeoSpectra

Modelos baseados em regressão de quadrados mínimos parciais (PLS) foram construídos visando determinar o teor de cocaína em amostras de rua. Inicialmente, construiu-se um modelo global visando estimar o teor de cocaína independentemente da sua forma e local de apreensão, 34 amostras foram retiradas do conjunto original de 409 amostras para as quais havia informação

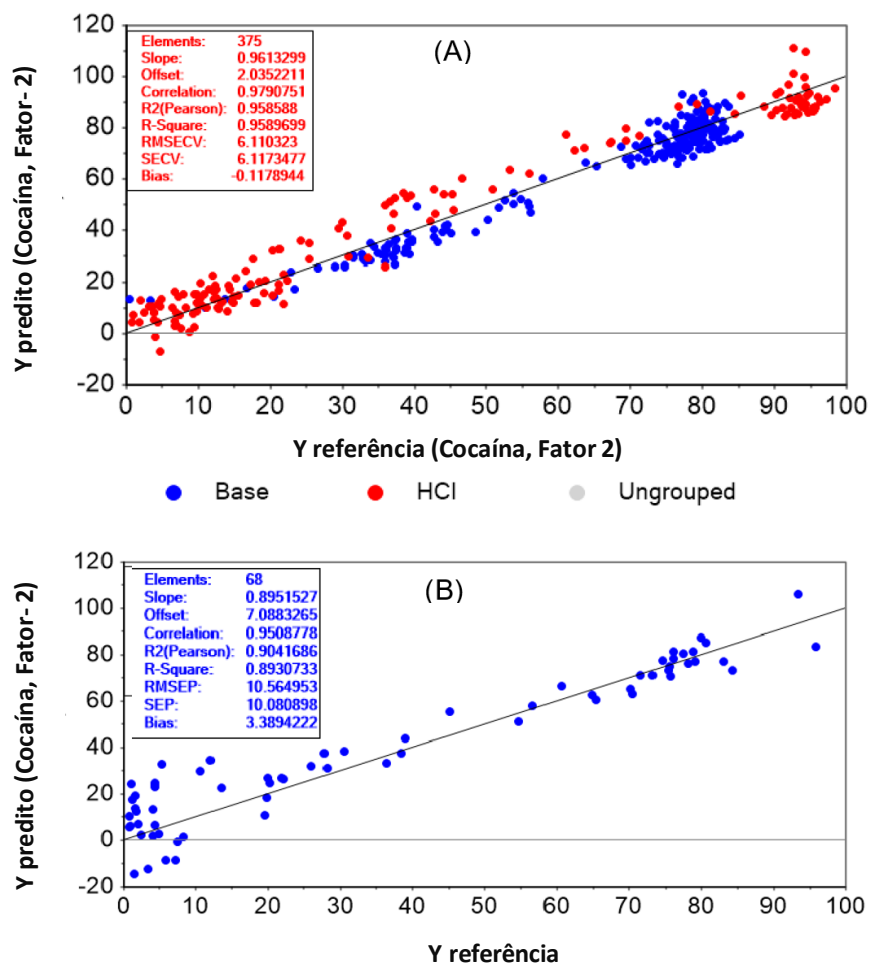
sobre o conteúdo de cocaína determinado no laboratório de criminalística da Polícia Federal em Brasília. A Figura 14 mostra os resultados de calibração do modelo PLS e a Tabela 2 permite observar as principais figuras de mérito analítico para este modelo. A inclusão de apenas 2 fatores (NF) levou ao melhor resultado de calibração alcançando um erro de validação cruzada (20 segmentos) igual a 6,1%.

O modelo global foi validado com um conjunto externo contendo as 95 amostras previamente classificadas como contendo cocaína. Os resultados podem ser observados na Figura 14 e na Tabela 3. Novamente, a variabilidade de composição das amostras contendo cocaína na forma HCl afetou significativamente o desempenho do modelo. O erro de previsão (RMSEP) e o desvio sistemático (BIAS) de validação foram respectivamente iguais a 10,6% e 3,3% e superiores aos valores do erro e desvio obtidos por validação cruzada. As amostras apreendidas contendo cocaína na forma HCl e com baixos teores da droga produziram os resultados mais insatisfatórios conforme pode ser observado nas Figuras 15 e Figura 16.

Modelos específicos para as formas base e HCl foram construídos. O modelo para a forma HCl não apresentou nenhum ganho. Enquanto aquele para a forma base obteve um ganho significativo com redução do erro de validação para 4,7%. Os resultados podem ser verificados nas figuras 15 e 16 e na Tabela 3.

Motivando-se pela grande variabilidade de composição das amostras apreendidas nos quatro estados, foi verificado se o emprego de modelos locais levaria a melhores resultados quantitativos. As amostras de validação foram apreendidas no estado de Pernambuco. Um modelo PLS foi então construído empregando-se somente as amostras contendo ambas as formas de cocaína do conjunto de calibração também apreendidas em Pernambuco, 4 variáveis latentes foram empregadas. Os resultados de calibração e validação podem ser visualizados na Figura 17 e mostram uma melhora sensível com o erro de validação cruzada (RMSECV) um pouco superior ao do modelo global (8,0%), mas com o erro de previsão resultante da validação externa (RMSEP) reduzido de 10,6% para 7,4% com um erro sistemático de 3,2%. Mesmo localmente, a variabilidade de composição das amostras contendo cocaína na forma HCl

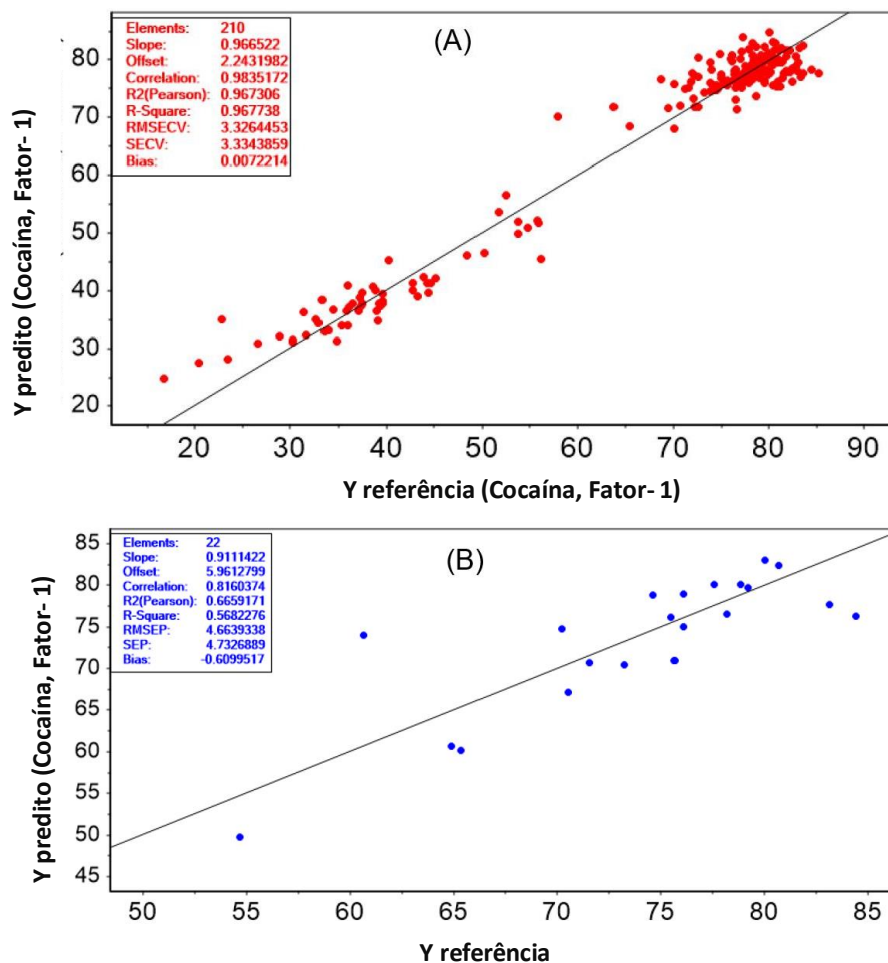
continua alta, contribuindo significativamente para a deterioração dos resultados quantitativos.



**Figura 14.** Resultados comparativos dos teores de cocaína determinados pelo método de referência e previstos pelo modelo global PLS baseado em NIR. (A) resultados de validação cruzada de calibração; (B) resultados de validação com amostras externas.

**Tabela 3.** Resultados dos modelos de regressão para determinação do teor de cocaína, cocaína base e cocaína HCl em amostras apreendidas.

Modelo	N	NF	Calibração			Validação			
			R <sup>2</sup>	RMSECV (%)	BIAS (%)	N	R <sup>2</sup>	RMSEP (%)	BIAS (%)
Global	375	2	0,958	6,1	-0,1	68	0,904	10,6	3,3
Base	210	1	0,967	3,3	0,007	22	0,666	4,7	-0,6
HCl	176	2	0,945	8,2	0,06	46	0,751	12,4	5,9

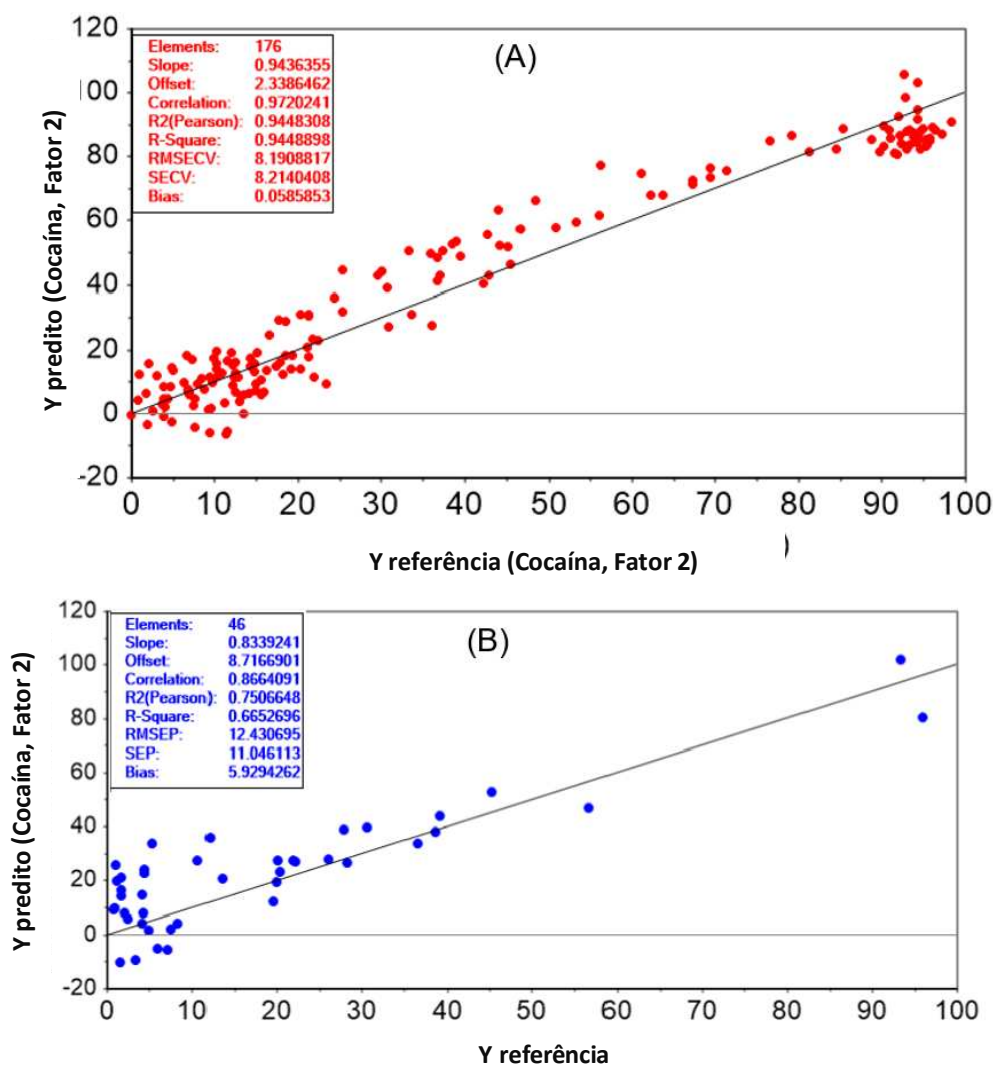


**Figura 15.** Resultados comparativos dos teores de cocaína na forma base determinados pelo método de referência e previstos pelo modelo PLS baseado em NIR, específico para a forma base. (A) resultados para validação cruzada de calibração; (B) resultados de validação com amostras externas.

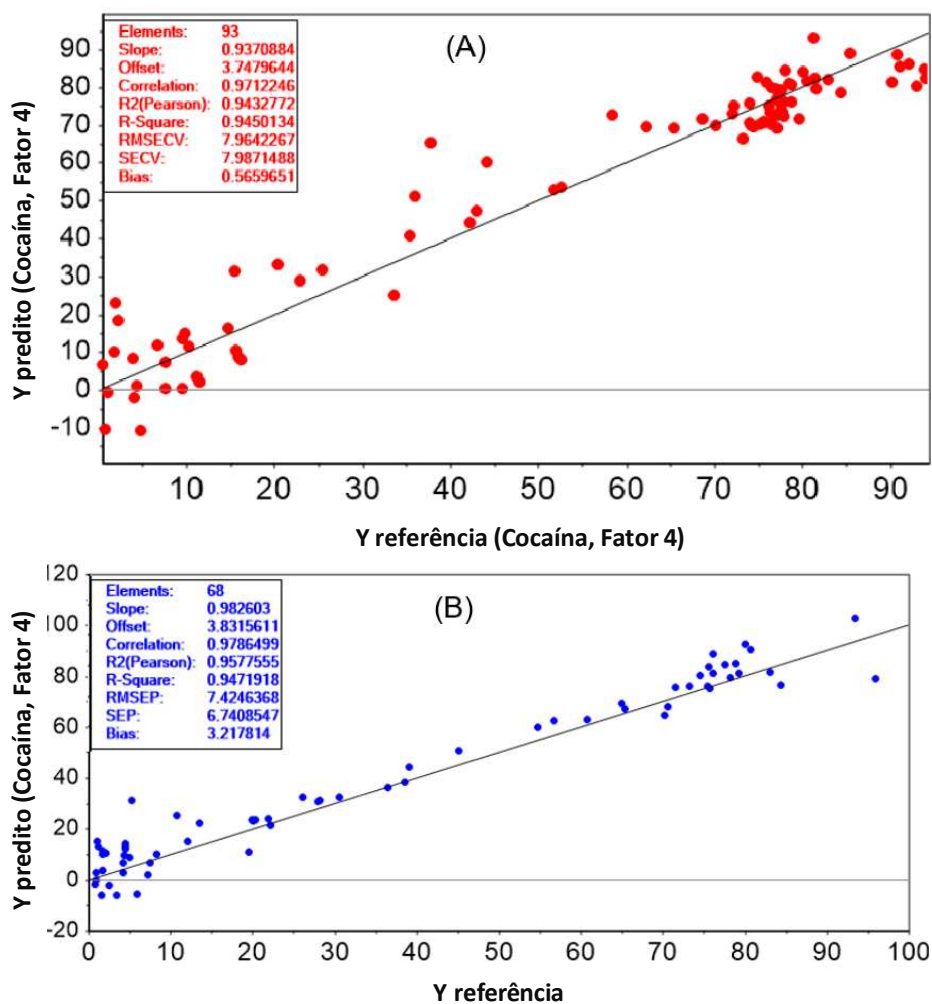
Observa-se que os mesmos quatro grupos de amostras detectados com uso do NeoSpectra são também detectados no conjunto de espectros obtidos com uso do NanoNIR. Estes grupos podem ser identificados de acordo com a forma da cocaína presente nas amostras e em relação ao local em que elas foram apreendidas. Os scores das amostras provenientes do estado do Mato Grosso são separados pela 1<sup>a</sup>, PC e a forma química da cocaína pela 2<sup>a</sup> PC.

As duas PCs capturam 91% da variância dos dados espectrais do conjunto de calibração, uma fração maior que aquela capturada pelo NeoSpectra (70,5%), provavelmente pela restrição da faixa espectral na qual o NanoNIR opera. Assim, as informações espectrais referentes à forma química das drogas são mais evidentes (71%) nos espectros obtidos com o NanoNIR

do que aquelas geradas pela composição química associada ao estado do Mato Grosso, que somente é observada na 2ª, PC (21%). É possível também afirmar que os espectros obtidos com uso do NanoNIR são mais simples apresentando menos fontes de variabilidade independentes, que são capturadas por um número menor de PCs.



**Figura 16.** Resultados comparativos de teores de cocaína na forma HCl determinados pelo método de referência e previstos pelo modelo PLS baseado em NIR específico para a forma HCl. (A) resultados de validação cruzada de calibração; (B) resultados de validação com amostras externas.

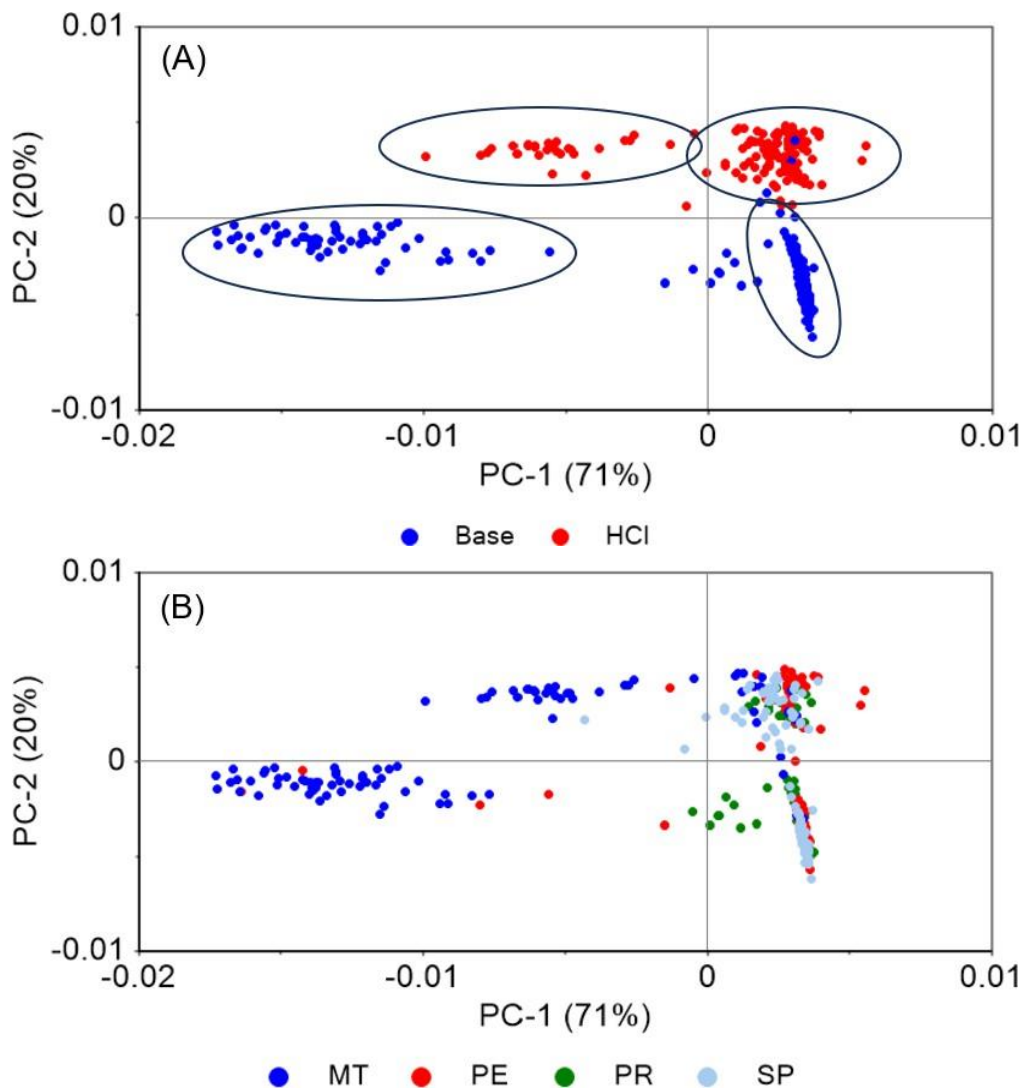


**Figura 17.** Resultados comparativos de teores de cocaína nas formas de base ou HCl determinados pelo método de referência e previstos pelo modelo PLS baseado em NIR específico para as amostras coletadas em Pernambuco. (A) resultados de validação cruzada de calibração; (B) resultados de validação com amostras externas também apreendidas em Pernambuco.

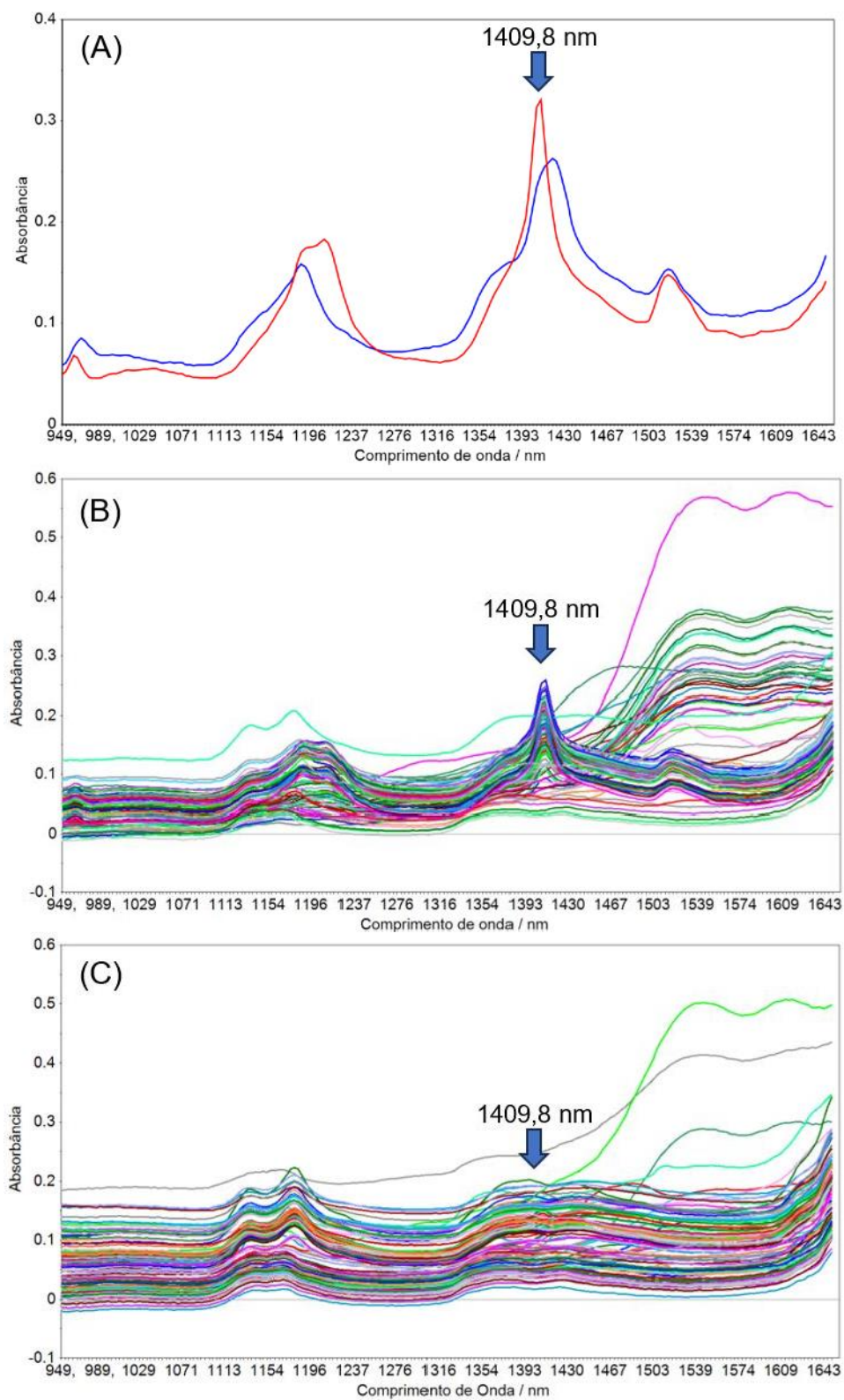
Os espectros das amostras apreendidas em Mato Grosso diferem daqueles apreendidas nos outros três estados por causa da presença da substância irganox 1010, como pode ser demonstrado observando-se a Figura 19. O pico de absorvância em 1409,8 nm, característico do irganox 1010, bem como outras ocorrências espectrais associadas e essa espécie química, estão presente nas amostras coletadas em Mato Grosso e ausentes nos espectros das amostras dos outros estados, como exemplificado pelos espectros das amostras apreendidas no estado do Paraná.

#### 4.6. Análise de Componentes Principais (PCA) e classificação SIMCA: NanoNIR

A Figura 18 mostra a distribuição dos scores da PCA realizadas sobre o conjunto de calibração de espectros das amostras de cocaína apreendidas, empregando o NanoNIR.



**Figura 18,** Distribuição dos scores dos espectros das amostras de cocaína obtidos com o NanoNIR nas duas primeiras PCs. (A) distribuição classificada pela forma química da cocaína; (B) distribuição classificada pelo local (estado) na qual a droga foi apreendida.



**Figura 19.** (A) Espectros NIR dos compostos irganox 1010 e 1076 puros; (B) espectros das amostras de cocaína apreendidas no estado do Mato Grosso; (C) espectros das amostras de cocaína apreendidas no estado do Paraná.

#### 4.7. Identificação da presença de cocaína e suas formas em amostras apreendidas empregando SIMCA: NanoNIR

Os resultados de classificação SIMCA obtidos para o modelo PCA global e para os modelos específicos para as formas base e HCl construídos com os espectros das amostras apreendidas obtidos com uso do instrumento NanoNIR da Texas podem ser observados na Tabela 4 e Figura 20 para o modelo global.

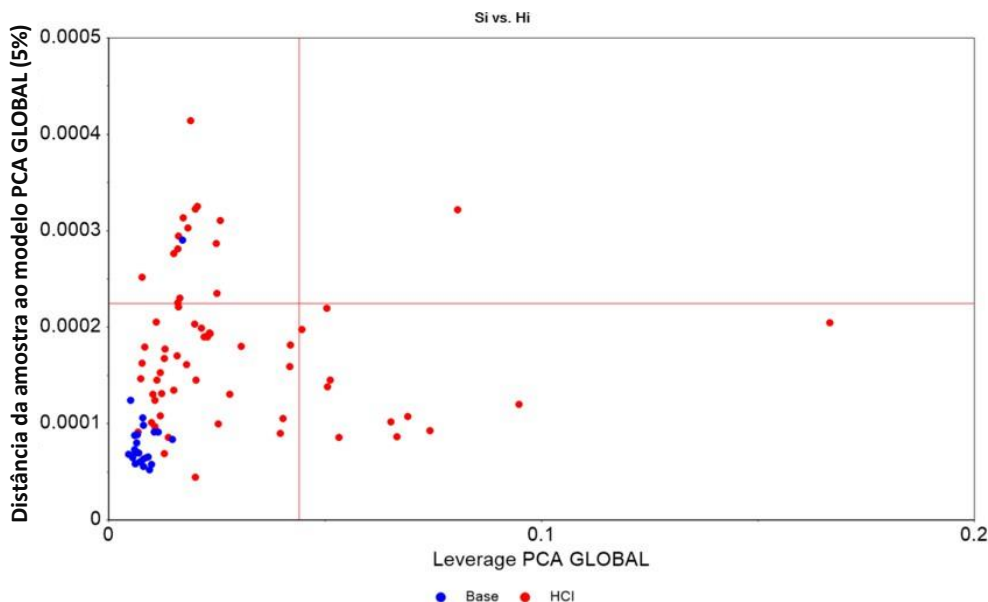
**Tabela 4.** Resultados de classificação SIMCA para validação dos modelos para cocaína, forma básica e forma HCl empregando-se os espectros obtidos com o NeoSpectra. Dados e cálculos completos podem ser encontrados no Apêndice A1.

Modelo	FPR %	FNR %	STR %	SPR %	EFR %
Global	20,0	23,3	70,1	77,8	56,7
Base	0,5	4,5	95,6	99,1	94,6
HCl	10,3	16,3	83,7	89,7	74,4

A Tabela 4 mostra os resultados de classificação SIMCA para a validação dos modelos de cocaína, tanto na forma base quanto HCl, utilizando espectros obtidos com o NeoSpectra. O modelo para a forma base obteve os melhores resultados, com uma baixa taxa de falsos positivos (0,5%) e negativos (4,5%), alta sensibilidade (95,6%), especificidade (99,1%) e eficiência global (94,6%). Em contraste, o modelo para a forma HCl teve uma taxa de falsos positivos de 10,3%, falsos negativos de 16,3%, sensibilidade de 83,7%, especificidade de 89,7% e eficiência global de 74,4%, indicando um desempenho inferior, possivelmente devido à maior variabilidade das amostras ou características espectrais menos distintas. O modelo global, que abrange ambos os tipos de cocaína, apresentou uma eficiência global de 56,7%, refletindo sua menor precisão em comparação com os modelos específicos para cada forma de cocaína, sugerindo que a combinação das duas formas dificulta a classificação e quantificação eficaz. Esses resultados indicam que a utilização de modelos separados para as formas base e HCl seria mais eficiente para uma análise mais precisa.

Avaliou-se o desempenho de um modelo local construído empregando-se somente as amostras apreendidas no estado de Pernambuco e um modelo construído somente com as amostras provenientes dos estados de

Pernambuco, Paraná e São Paulo. Porém, resultados semelhantes aos obtidos com o uso do NeoSpectra apresentou um desempenho semelhante ao obtido com o modelo global.



**Figura 20.** Resultados de classificação SIMCA das amostras de validação externa contendo cocaína empregando-se o modelo global (base + HCl) construído com espectros obtidos com o instrumento NanoNIR.

Assim, como observado para resultados obtidos com o NeoSpectra, aqueles obtidos com o NanoNIR evidenciam que os modelos global e local operam com eficiência para a detecção de cocaína na forma base, mas de forma deficiente na classificação de amostras na forma HCl. Este fato pode ser consequência da alta variabilidade de composição das amostras nas quais a forma HCl é encontrada e devido a que a forma base está presente em teores mais altos nas amostras apreendidas.

Comparando-se o desempenho dos dois equipamentos na classificação de amostras de cocaína observa-se que o NeoSpectra entregou os melhores resultados. O melhor desempenho do NeoSpectra pode ser atribuído a faixa espectral mais ampla monitorada por este equipamento o que aumenta a informação espectral disponível para a elaboração dos modelos.

#### **4.8. Determinação do teor de cocaína empregando PLS: NanoNIR**

Modelos de regressão PLS foram desenvolvidos para possibilitar a avaliação do desempenho do NanoNIR ao estimar a concentração de cocaína e de suas formas químicas nas amostras apreendidas,

A Figura 21 mostra os resultados de calibração e validação obtidos para o modelo global para a determinação de cocaína em qualquer uma das suas formas. As amostras de validação correspondem àqueles presentes no conjunto de validação que foram previamente classificadas como contendo cocaína em qualquer forma pelo empregando-se SIMCA.

Certas amostras não promovem uma boa modelagem devido à variabilidade nas amostras de rua, como a presença de adulterantes, diluentes e variações nos níveis de pureza da cocaína. Essa diversidade dificulta a criação de modelos precisos, especialmente em modelos globais que tentam estimar a concentração de cocaína nas formas base e HCl. Amostras com características espectrais muito diferentes das de calibração podem reduzir a acuracidade da regressão, levando a erros maiores nas previsões e dificultando a generalização do modelo.

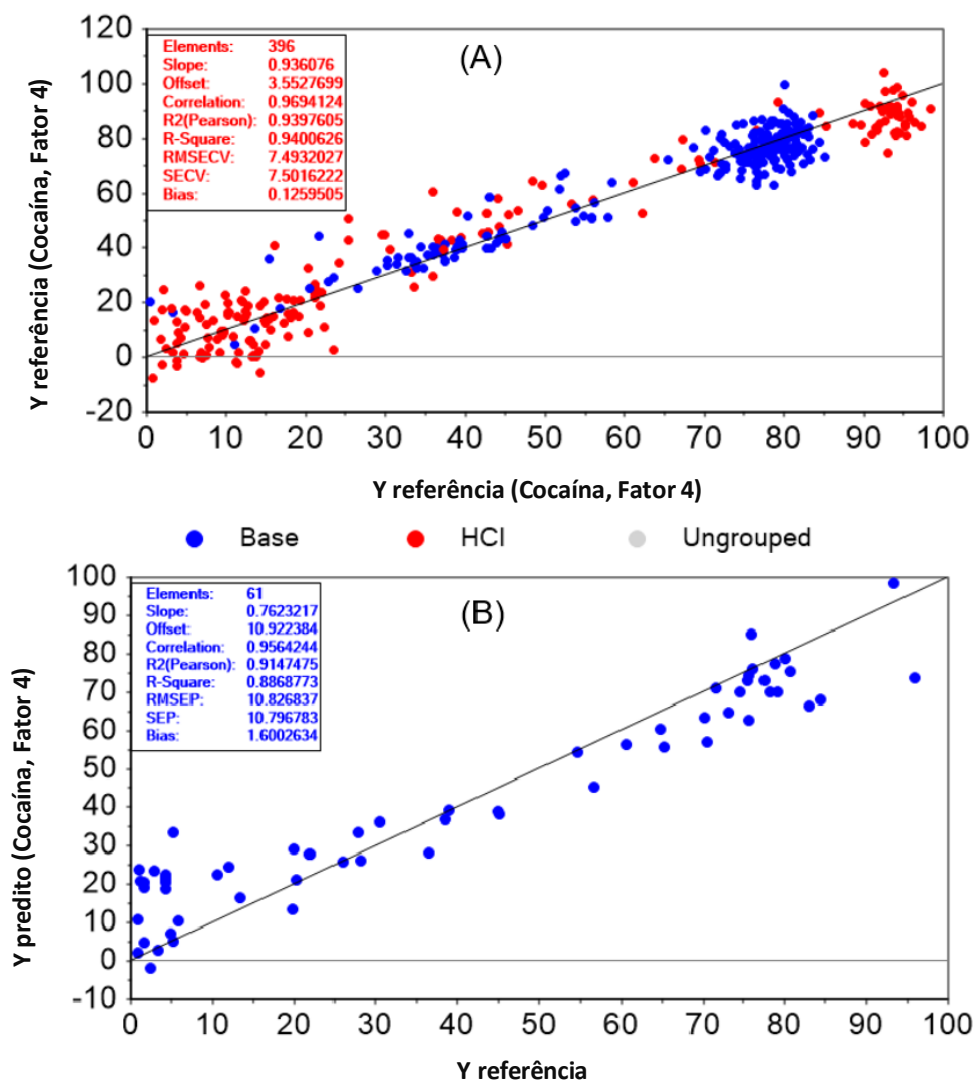
A Tabela 5 resume os resultados de calibração e validação obtidos para os três modelos construídos.

De forma diferente dos resultados de classificação, os resultados quantitativos obtidos com uso dos dois instrumentos se mostram equivalentes com pequena variação entre as figuras de mérito de validação externa.

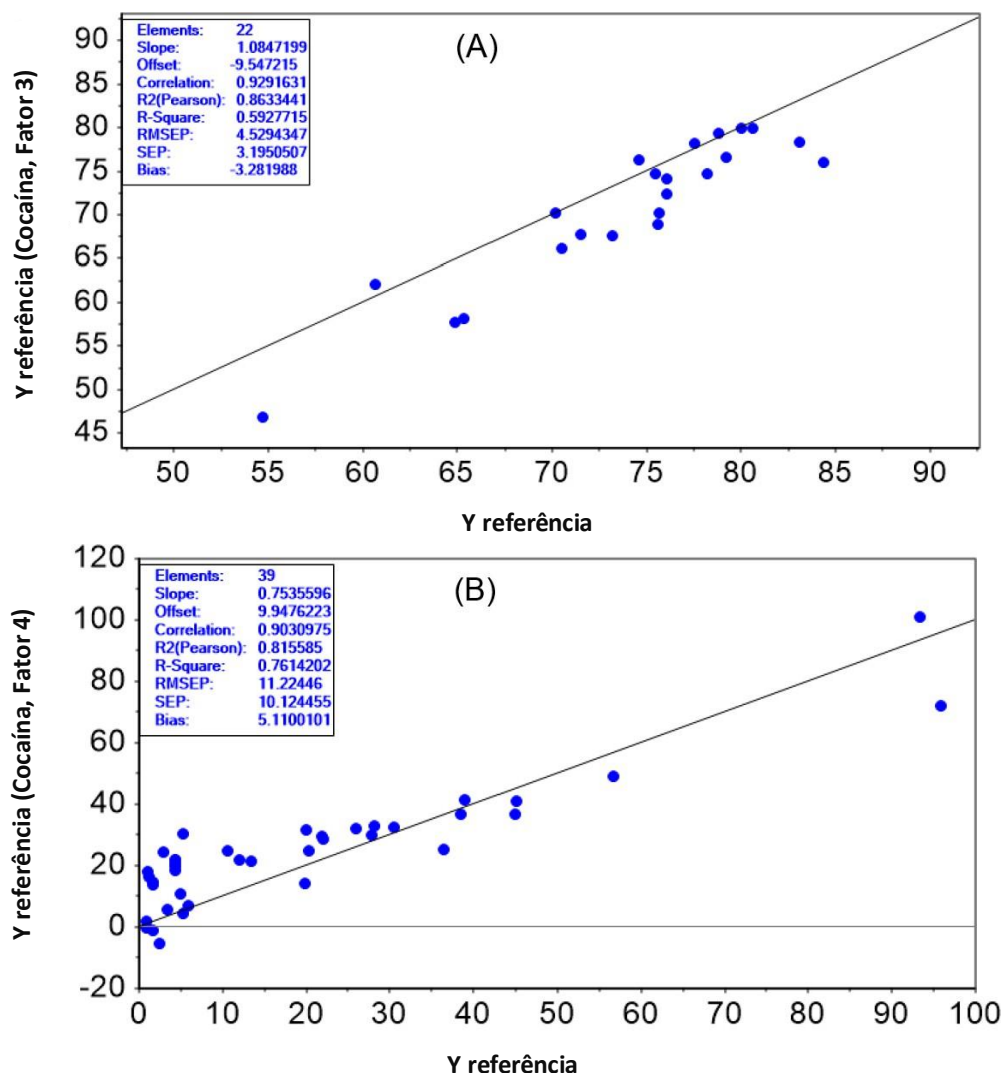
Modelos PLS específicos construídos empregando-se somente as amostras de calibração apreendidas no estado de Pernambuco não proporcionou melhoria significativa no desempenho para a determinação de cocaína independentemente da sua forma química. Aparentemente, o desempenho dos modelos quantitativos, assim como os de classificação, é limitado pela alta variabilidade de composição das amostras apreendidas na rua. Esta variabilidade é mais acentuada quando a forma química da cocaína presente nas amostras é a HCl, refletindo no pior desempenho qualitativo e quantitativo dos modelos construídos com uso dos dois instrumentos avaliados neste trabalho.

A Figura 22 mostra os resultados de validação externa obtidos com as amostras de cocaína previamente classificadas como contendo a forma

base e HCl.



**Figura 21.** Resultados de calibração (A) e de validação (B) gerados por modelos PLS construídos para a determinação de cocaína (em qualquer forma química) em amostras apreendidas.



**Figura 22.** Resultados de validação externa obtidos para as amostras de cocaína previamente classificadas contendo (A), forma base e (B), forma HCl.

**Tabela 5,** Resultados de calibração e validação externa para os modelos global, para as formas químicas base e HCl construídos com dados espectrais obtidos com o instrumento NanoNIR,

Modelo	Calibração					Validação			
	N	NF	R <sup>2</sup>	RMSECV (%)	BIAS (%)	N	R <sup>2</sup>	RMSEP (%)	BIAS (%)
Global	396	4	0,940	7,5	0,1	61	0,915	10,8	1,6
Base	208	3	0,967	3,0	0,04	22	0,863	4,5	-3,2
HCl	173	4	0,946	8,1	0,2	39	0,816	11,2	5,1

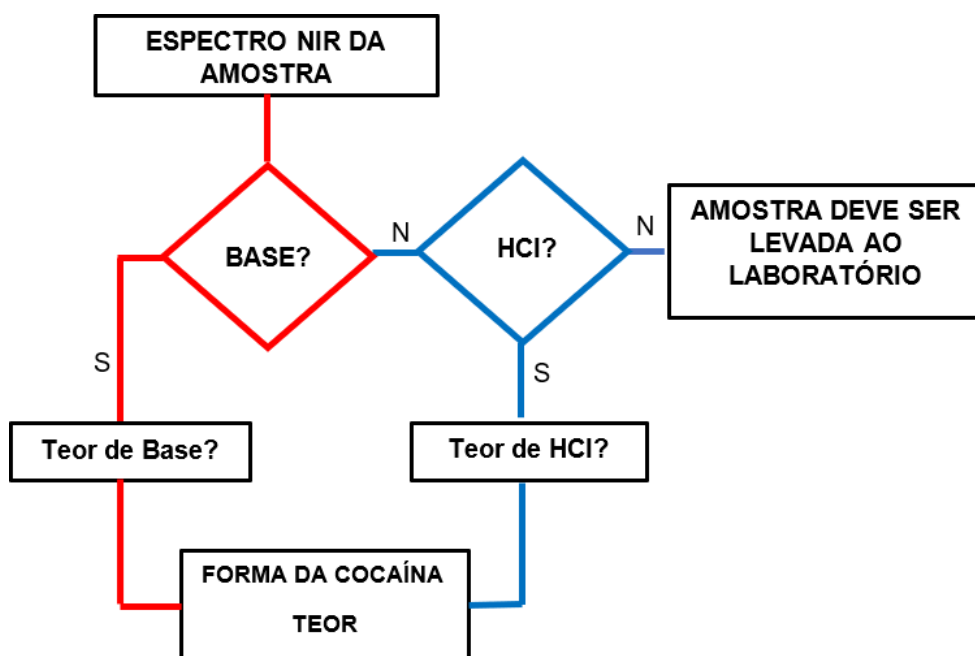
## 5. Conclusões

Os resultados deste trabalho destacam as vantagens e limitações do uso da espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) na identificação e quantificação de cocaína em amostras apreendidas nas ruas. As vantagens incluem a rapidez na obtenção dos resultados, o baixo custo das análises e a possibilidade de realizar as determinações diretamente no campo. No entanto, ao comparar os resultados obtidos com os de estudos anteriores, observa-se que os dados deste trabalho são inferiores, especialmente devido ao uso de um conjunto de validação externo e amostras com maior variabilidade, o que compromete as figuras de mérito.

As amostras de rua apresentam uma variabilidade maior em sua composição, decorrente da presença de adulterantes e diluentes, o que dificulta a criação de um conjunto representativo para calibração. Embora tenha sido avaliado o uso de modelos locais, que consideram apenas amostras coletadas em Pernambuco, os resultados de classificação não melhoraram significativamente, sugerindo que a principal variável a ser considerada na construção dos modelos é a variabilidade das amostras, que não foi totalmente contemplada nos conjuntos utilizados.

Os dois espectrofotômetros NIR compactos, o NanoNIR e o NeoSpectra, apresentaram desempenho semelhante tanto na identificação quanto na quantificação da cocaína. Contudo, o NanoNIR se destacou por ser o instrumento de melhor custo-benefício, com preço cerca de cinco vezes menor que o NeoSpectra. Com base nos resultados obtidos, pode-se recomendar o uso desses instrumentos para a análise preliminar de amostras de rua, especialmente para amostras contendo cocaína na forma base, que apresentam melhores resultados de classificação e quantificação. Para essas amostras, os erros de quantificação foram de 3,3 e 3,0% com o NeoSpectra e o NanoNIR, respectivamente. Enquanto para a forma HCl, as figuras de mérito foram inferiores, com erros de quantificação de 12,4 e 11,2%, respectivamente. Em conclusão, a espectroscopia NIR pode ser uma ferramenta útil para triagem preliminar de amostras de cocaína apreendidas, embora a variabilidade das amostras de rua e a forma da droga (HCl ou base) influenciem a precisão dos resultados. Mesmo com essas limitações, a abordagem proposta pode ser eficaz para identificar rapidamente amostras, enquanto aquelas mais

complexas devem ser encaminhadas para análise laboratorial mais detalhada. Com base nos resultados obtidos neste trabalho, pode-se recomendar o procedimento descrito na Figura 22 para se realizar uma análise preliminar (*screening*) de amostras de rua apreendidas empregando-se os instrumentos compactos NeoSpectra ou NanoNIR.



**Figura 22.** Esquema sugerido para emprego da espectroscopia NIR e os espectrofotômetros NeoSpectra e NanoNIR na análise preliminar de amostras de cocaína apreendidas na rua.

## Referências

- [1] COPPEY, F.; BÉCUE, A.; SACRÉ, P.-Y.; ZIEMONS, E, M.; HUBERT, P.; ESSEIVA, P. Providing illicit drugs results in five seconds using ultra-portable NIR technology: an opportunity for forensic laboratories to cope with the trend toward the decentralization of forensic capabilities. *Forensic Science International*, v. 110498, 2020.
- [2] MARANGONI, S, R.; DE OLIVEIRA, Magda L. F. Fatores desencadeantes do uso de drogas de abuso em mulheres. *Texto & Contexto Enfermagem*, Santa Catarina, v. 22, p. 662-670, 2013.
- [3] NEVES, Elcione Alves Sorna; SEGATTO, Maria Luiza, Drogas lícitas e ilícitas: uma temática contemporânea, *Revista da Católica*, Uberlândia, v. 3, n. 5, 2011.
- [4] ARAUJO, R. W.; CARDOSO, G. M. T.; ROCHA, G. R.; SANTANA, P. H. M.; MUNOZ, A. A. R.; RICHTER, M. E.; PAIXÃO, C. L. R. T.; COLTRO, T. K. W. Portable analytical platforms for forensic chemistry: a review. *Analytica Chimica Acta*, v, 1034, p. 1-21, 2018.
- [5] UNITED NATIONS OFFICE ON DRUGS AND CRIME (UNODC). *World Drug Report 2022*, New York: United Nations, 2022.
- [6] BASTOS, F. I. P. M.; VASCONCELLOS, M. T. L.; BONI, R. B.; REIS, N. B.; COUTINHO, S. C. F. III Levantamento Nacional sobre o uso de drogas pela população brasileira, Rio de Janeiro: ICICT/FIOCRUZ, 2017.
- [7] AZEVEDO, R. C. S. Aids e usuários de cocaína: um estudo sobre comportamentos de risco, 2000. Tese (Doutorado) – Faculdade de Medicina, Universidade Estadual de Campinas.
- [8] JOHN, K. D.; SOUZA, S. K.; FERRÃO, F. M. Overview of cocaine identification by vibrational spectroscopy and chemometrics. *Forensic Science International*, v. 342, p. 1-11, 2023.
- [9] SCOTT, L. J. Specific field test for cocaine. *Microgram*, Estados Unidos, v. 6, p. 179-181, 1973.
- [10] MESSIAS, M. J. P. Classificação de amostras de pó branco utilizando teste de Scott, análise de imagem e discriminação por mínimos quadrados parciais, 2022. 30 f. Dissertação (Mestrado) – Universidade de Brasília. Instituto de Química. Brasília. 2022.
- [11] HESPANHOL, C. M.; PASQUINI, C.; MALDANER, O. A. Evaluation of a low-cost portable near-infrared spectrophotometer for in situ cocaine profiling. *Talanta*, v. 200, p. 553–561, 2019.
- [12] COPPEY, F.; BÉCUE, A.; SACRÉ, Y. P.; ZIEMONS, M. E.; HUBERT, P.; ESSEIVA, P. Providing illicit drugs results in five seconds using ultra-portable

NIR technology: an opportunity for forensic laboratories to cope with the trend toward the decentralization of forensic capabilities. *Forensic Science International*, v. 317, p. 1-13, 2020.

[13] PASQUINI, C, Near infrared spectroscopy: a mature analytical technique with new perspectives – A review. *Analytica Chimica Acta*, v. 1026, p. 8-36, 2018.

[14] ELIAERTS, J.; MEERT, N.; DARDENNE, P.; BAETEN, V.; PIERNA, F. A. J.; DURME, V. F.; WAEL, K.; SAMYN, N. J. Comparison of spectroscopic techniques combined with chemometrics for cocaine powder analysis. *Analytical Toxicology*, v. 44, p. 851–860, 2020.

[15] LIU, M. C.; YU HAN, Y.; MIN, G. D.; JIA, W.; MENG, X.; LIU, P. P. Rapid qualitative and quantitative analysis of methamphetamine, ketamine, heroin, and cocaine by near-infrared spectroscopy. *Forensic Science International*, v. 290, p. 162-168, 2018.

[16] STARK, E.; LUCHTER, K.; MARGOSHES, M. Near-infrared analysis (NIRA): a technology for quantitative and qualitative analysis. *Applied Spectroscopy Reviews*, v. 21, p. 335-399, 1986.

[17] PRIETO, N.; PAWLUCZYK, O.; DUGAN, M. E. R.; AALHUS, J. L. A review of the principles and applications of near-infrared spectroscopy to characterize meat, fat, and meat products. *Applied Spectroscopy*, v. 71, n. 7, p. 1403–1426, 2017.

[18] PASQUINI, C. Near infrared spectroscopy: fundamentals, practical aspects and analytical applications. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, v. 14, p. 198-219, 2003.

[19] CORREIA, M. R.; DOMINGOS, E.; TOSATO, F.; SANTOS, A. N.; LEITE, A. J.; SILVA, M.; MARCELO, A. C. M.; ORTIZ, S. R.; FILGUEIRAS, R. P.; ROM, W. W. Portable near infrared spectroscopy applied to abuse drugs and medicine analyses. *Analytical Methods*, v. 10, p. 593–603, 2018.

[20] TSUJIKAWA, K.; YAMAMURO, T.; KUWAYAMA, K.; KANAMORI, T. Application of a portable near infrared spectrometer for presumptive identification of psychoactive drugs. *Forensic Science International*, v. 242, p. 162–171, 2014.

[21] PAIVA, M. E.; ROHWEDDER, R. J. J.; PASQUINI, C.; PIMENTEL, F. M.; PEREIRA, F. C. Quantification of biodiesel and adulteration with vegetable oils in diesel/biodiesel blends using portable near-infrared spectrometer. *Fuel*, v. 160, p. 57–63, 2015.

[22] LUTZ, D. M. O.; BONN, G. K.; RODE, B. M.; HUCK, C. W. Reproducible quantification of ethanol in gasoline via a customized mobile near-infrared spectrometer. *Analytica Chimica Acta*, v. 826, p. 61–68, 2014.

[23] VIGREN, D. Identification of environmental plastic samples from a Caribbean beach survey by near-infrared spectroscopy with the MicroNIR and chemometric analysis, 2015, 52 f. Independent thesis (Bachelor's Degree) – Örebro University, Örebro, 2015.

[24] MELUCCI, D.; MONTI, D.; D'ELIA, M.; LUCIANO, G. Rapid in situ repeatable analysis of drugs in powder form using reflectance near-infrared spectroscopy and multivariate calibration. *Journal of Forensic Sciences*, v. 57, p. 86–92, 2012.

[25] FERREIRA, C. M. M. Quimiometria: Conceitos, Métodos e Aplicações, Campinas, SP: Editora da Unicamp, 2015, p. 13-487.

## APÊNDICE A-CÁLCULOS DETALHADOS DAS FIGURAS DE MERITO

### NEO – CLASSIFICAÇÃO GLOBAL - COCAÍNA

$$\text{FPR} = [\text{FP}/(\text{FP} + \text{TN})] \times 100 = [1 / (1 + 35)] \times 100 = 2,8\%$$

$$\text{FNR} = [\text{FN}/(\text{FN} + \text{TP})] \times 100 = [22 / (22 + 65)] \times 100 = 25,3\%$$

$$\text{STR} = [\text{TP}/(\text{TP} + \text{FN})] \times 100 = [65 / (65 + 22)] \times 100 = 74,7\%$$

$$\text{SPR} = (\text{TN}/(\text{TN} + \text{FP})) \times 100 = [35 / (35 + 1)] \times 100 = 97,2\%$$

$$\text{EFR} = 100 - (\text{FPR} + \text{FNR}) = 100 - (2,8 + 25,3) = 71,9\%$$

### NEO – SUB-CLASSIFICAÇÃO - FORMAS BÁSICA ou HCl

#### BASE

$$\text{FPR} = [\text{FP}/(\text{FP} + \text{TN})] \times 100 = [0 / (0 + 83)] \times 100 = 0\%$$

$$\text{FNR} = [\text{FN}/(\text{FN} + \text{TP})] \times 100 = [0 / (0 + 22)] \times 100 = 0\%$$

$$\text{STR} = [\text{TP}/(\text{TP} + \text{FN})] \times 100 = [22 / (22 + 0)] \times 100 = 100\%$$

$$\text{SPR} = (\text{TN}/(\text{TN} + \text{FP})) \times 100 = [83 / (83 + 0)] \times 100 = 100\%$$

$$\text{EFR} = 100 - (\text{FPR} + \text{FNR}) = 100 - (0 + 0) = 100\%$$

#### HCl

$$\text{FPR} = [\text{FP}/(\text{FP} + \text{TN})] \times 100 = [4 / (4 + 54)] \times 100 = 7,0\%$$

$$\text{FNR} = [\text{FN}/(\text{FN} + \text{TP})] \times 100 = [7 / (7 + 40)] \times 100 = 14,9\%$$

$$\text{STR} = [\text{TP}/(\text{TP} + \text{FN})] \times 100 = [40 / (40 + 7)] \times 100 = 85,1\%$$

$$\text{SPR} = (\text{TN}/(\text{TN} + \text{FP})) \times 100 = [54 / (54 + 4)] \times 100 = 93,1\%$$

$$\text{EFR} = 100 - (\text{FPR} + \text{FNR}) = 100 - (7,0 + 14,9) = 78,1\%$$

### TEXAS – CLASSIFICAÇÃO GLOBAL – COCAÍNA

$$\text{FPR} = [\text{FP}/(\text{FP} + \text{TN})] \times 100 = [9 / (9 + 36)] \times 100 = 20,0\%$$

$$\text{FNR} = [\text{FN}/(\text{FN} + \text{TP})] \times 100 = [26 / (26 + 61)] \times 100 = 23,3\%$$

$$\text{STR} = [\text{TP}/(\text{TP} + \text{FN})] \times 100 = [61 / (61 + 26)] \times 100 = 70,1\%$$

$$\text{SPR} = (\text{TN}/(\text{TN} + \text{FP})) \times 100 = [35 / (35 + 10)] \times 100 = 77,8\%$$

$$\text{EFR} = 100 - (\text{FPR} + \text{FNR}) = 100 - (20,0 + 23,3) = 56,7\%$$

### **TEXAS – SUB-CLASSIFICAÇÃO - FORMAS BÁSICA ou HCl BASE**

$$\text{FPR} = [\text{FP}/(\text{FP} + \text{TN})] \times 100 = [1 / (1 + 112)] \times 100 = 0,9\% \text{ (Total Neg = NEG + HCl)}$$

$$\text{FNR} = [\text{FN}/(\text{FN} + \text{TP})] \times 100 = [1 / (1 + 22)] \times 100 = 4,5\%$$

$$\text{STR} = [\text{TP}/(\text{TP} + \text{FN})] \times 100 = [22 / (22 + 1)] \times 100 = 95,6\%$$

$$\text{SPR} = (\text{TN}/(\text{TN} + \text{FP})) \times 100 = 112 / (112 + 1) \times 100 = 99,1\%$$

$$\text{EFR} = 100 - (\text{FPR} + \text{FNR}) = 100 - (0,9 + 4,5) = 94,6\%$$

### **HCl**

$$\text{FPR} = [\text{FP}/(\text{FP} + \text{TN})] \times 100 = [7 / (7 + 61)] \times 100 = 10,3\% \text{ (Total Neg = NEG + Base)}$$

$$\text{FNR} = [\text{FN}/(\text{FN} + \text{TP})] \times 100 = [7 / (7 + 36)] \times 100 = 16,3\%$$

$$\text{STR} = [\text{TP}/(\text{TP} + \text{FN})] \times 100 = [36 / (36 + 7)] \times 100 = 83,7\%$$

$$\text{SPR} = (\text{TN}/(\text{TN} + \text{FP})) \times 100 = [61 / (61 + 7)] \times 100 = 89,7\%$$

$$\text{EFR} = 100 - (\text{FPR} + \text{FNR}) = 100 - (10,3 + 16,3) = 73,4\%$$

**ANEXO A-COMPOSIÇÃO DAS 423 AMOSTRAS APREENDIDAS E ANALISADAS POR ESPECTROSCOPIA NIR PARA CONSTRUIR OS MODELOS**

amostra	Estado	forma (hcl; base; mistura; n,d,)	Concentração (%)													
			benzocaina	paracetamol	fenacetina	cafeina	lidocaina	aminopirina	levamisol	procaina	hidroxizina	diltiazem	cocaina	cis-cinamolicocaina	trans-cinamolicocaina	
1	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	12,0	2,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	46,7	0,7	0,7
2	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	94,4	1,4	1,5
3	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	71,3	0,0	0,0
4	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	96,1	0,6	0,6
5	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	93,8	1,5	2,0
6	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	93,4	0,8	0,9
7	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	9,6	3,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	39,0	0,5	0,6
8	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	7,5	0,0	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	67,2	0,9	0,7
9	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	9,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	36,0	0,5	0,7
10	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	94,7	1,5	1,8
11	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	2,6	0,0	0,0	12,2	0,0	0,0	0,0	0,0	69,5	0,8	1,1
12	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	9,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	39,6	0,0	0,0
13	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	32,9	0,0	0,0
14	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	91,8	1,8	2,0
15	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	94,1	1,4	1,5
16	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	61,1	0,8	0,7
17	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	19,6	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	24,3	0,2	0,2
18	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	93,4	1,4	1,4
19	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	92,8	1,2	1,3
20	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,8	0,0	0,0	0,0	0,0	69,4	0,8	1,1
21	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	94,3	1,2	0,9
22	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	43,0	0,0	0,0	0,0	0,0	49,1	0,0	0,0
23	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	94,9	0,8	0,8

24	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	91,5	1,5	1,7
25	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	89,7	2,1	2,5
26	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	14,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	51,0	0,4	0,4
27	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	52,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	30,9	0,4	0,5
28	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,1	0,0	0,0	81,2	1,0	1,2
29	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	92,4	1,2	2,4
30	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	1,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	56,2	0,0	0,0
31	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	47,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	45,5	0,0	0,0
32	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	1,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	49,7	0,3	0,4
33	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	14,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	56,1	0,3	0,3
34	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	15,2	0,0	0,0	0,0	76,7	0,0	0,0
35	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	94,3	0,0	0,0
36	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	11,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	63,7	1,0	0,8
37	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	93,8	1,6	3,0
38	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	95,4	1,1	1,2
39	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	33,3	0,0	0,0
40	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	42,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	36,8	0,5	0,7
41	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	48,4	0,8	0,7
42	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	94,3	1,2	1,1
43	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	5,1	1,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	38,5	0,4	0,5
44	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	84,6	1,7	1,5
45	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	9,3	4,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	53,3	0,5	1,0
46	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	42,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	45,3	0,3	0,4
47	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	39,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	36,7	0,8	0,6
48	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	88,7	0,9	1,1
49	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	94,6	1,5	1,0
50	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	28,2	4,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	12,4	0,3	0,3
51	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	94,3	1,6	1,9

52	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	63,3	0,0	0,0	0,0	29,0	0,0	0,0
53	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	95,8	1,2	1,2
54	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	93,0	1,6	1,9
55	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	13,0	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	67,3	1,0	1,0
56	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	44,1	0,0	0,0
57	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	68,8	3,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,3	0,3	0,4
58	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	92,0	0,3	0,3
59	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	6,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,3	1,1	1,1
60	PR	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	90,3	0,9	2,0
61	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,4	5,0	5,3
62	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,8	6,0	4,8
63	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,1	6,6	6,1
64	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,0	5,6	4,7
65	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	82,8	3,6	2,9
66	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	83,2	3,8	2,3
67	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,6	5,9	5,0
68	PR	Base	0,0	0,0	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	73,9	6,9	6,9
69	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,9	5,3	5,0
70	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,8	4,2	3,4
71	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	82,5	6,8	5,2
72	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,2	6,5	6,0
73	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	81,0	6,0	4,5
74	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	70,1	4,5	5,1
75	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	71,2	0,8	2,5
76	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	81,8	5,6	3,6
77	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	73,9	7,6	6,8
78	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,8	5,2	6,2
79	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,3	2,8	2,3

80	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	74,6	5,7	6,1
81	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	72,7	4,9	5,1
82	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	75,0	4,9	6,0
83	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,1	5,9	5,7
84	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,2	6,0	6,0
85	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,2	5,2	5,1
86	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	69,5	3,3	3,1
87	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	72,1	1,2	1,2
88	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	81,9	5,5	4,2
89	PR	Base	0,0	0,0	1,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,4	5,3	5,4
90	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	72,3	5,3	4,9
91	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,1	5,8	7,3
92	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	74,7	3,5	2,8
93	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	72,6	5,4	6,3
94	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	82,3	3,9	2,4
95	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,4	5,6	3,8
96	PR	Base	0,0	0,0	32,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	49,8	3,5	3,7
97	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,6	5,0	4,7
98	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,7	5,5	5,9
99	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	74,5	5,4	6,4
100	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	75,1	4,8	4,7
101	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	75,6	5,1	5,3
102	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	70,7	5,0	4,9
103	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,8	5,8	7,9
104	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,7	4,7	4,6
105	PR	Base	0,0	0,0	7,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	71,7	5,3	5,7
106	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	81,8	5,6	4,5
107	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,9	7,2	5,3

108	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,9	4,7	4,8
109	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,2	4,8	4,9
110	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	85,2	4,6	3,6
111	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	83,3	4,6	3,3
112	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,9	5,5	4,7
113	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,6	4,6	4,8
114	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,6	5,2	4,8
115	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	81,5	6,2	4,2
116	PR	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,9	6,2	5,6
117	PE	ND	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
118	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	32,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,3	0,0	0,0
119	PE	HCl	0,0	0,0	2,1	52,5	1,6	0,0	4,4	0,0	0,0	0,0	9,6	0,0	0,0
120	PE	ND	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
121	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	39,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,1	0,0	0,0
122	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,8	0,0	0,0
123	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	28,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,9	0,0	0,0
124	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	40,4	3,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	44,2	0,0	0,0
125	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	22,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	62,3	0,8	0,8
126	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	69,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	15,6	0,0	0,0
127	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	20,0	5,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,0	0,0	0,0
128	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	90,3	1,1	1,5
129	PE	ND	0,0	0,0	0,0	0,0	69,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
130	PE	ND	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
131	PE	Base	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	15,5	0,8	0,6
132	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	54,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,8	0,0	0,0
133	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	21,2	6,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	42,2	0,5	0,6
134	PE	ND	0,0	0,0	0,0	5,0	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
135	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	21,6	5,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	43,0	0,5	0,6

136	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	91,1	1,6	1,6
137	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	93,0	1,7	1,8
138	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	85,4	0,0	0,0
139	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	67,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	11,4	0,0	0,0
140	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	94,1	1,1	1,0
141	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	33,7	2,0	1,7
142	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,8	0,0	0,0
143	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	34,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,6	0,0	0,0
144	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,2	0,0	0,0
145	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	92,2	0,0	0,0
146	PE	HCl	0,0	0,0	3,4	64,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,9	0,0	0,0
147	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	28,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	20,4	0,3	0,3
148	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	50,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,7	0,0	0,0
149	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,0	0,0	0,0
150	PE	ND	0,0	0,0	0,0	21,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
151	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	90,8	0,0	0,0
152	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	70,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	13,3	0,0	0,0
153	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	54,5	1,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	14,8	0,2	0,3
154	PE	ND	0,0	0,0	0,0	18,0	9,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
155	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	94,0	1,2	1,7
156	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	70,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	13,8	0,0	0,0
157	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	37,8	0,0	0,0
158	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	74,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	16,0	0,0	0,0
159	PE	HCl	0,0	0,0	11,0	61,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,8	0,0	0,0
160	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	92,8	0,0	0,0
161	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	6,3	3,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	16,2	0,3	0,3
162	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	35,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	10,2	0,0	0,0
163	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	17,0	8,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	36,0	0,5	0,5

164	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	18,8	6,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	25,4	0,4	0,4
165	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	52,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,5	0,0	0,0
166	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	11,1	0,4	0,4
167	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	81,4	2,8	2,3
168	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	74,0	3,8	3,1
169	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	65,4	2,6	3,9
170	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,8	0,0	0,0	0,0	0,0	72,3	2,0	3,2
171	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,6	2,9	2,3
172	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	52,6	1,3	1,3
173	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	75,6	0,9	0,9
174	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	75,2	0,8	0,6
175	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,1	1,8	1,1
176	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,3	6,3	5,7
177	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,7	3,4	2,9
178	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	74,2	2,3	2,2
179	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	74,4	1,9	1,7
180	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	73,3	2,1	1,5
181	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	81,6	4,7	4,2
182	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,2	3,9	3,2
183	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	74,0	2,9	2,4
184	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	75,7	1,5	0,8
185	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	70,2	1,8	1,4
186	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,8	0,8	0,5
187	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,4	1,9	1,4
188	PE	Base	0,0	0,0	28,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	24,1	1,0	1,0
189	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,2	1,5	0,9
190	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,6	1,6	1,4
191	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	35,4	2,8	2,4

192	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,5	1,9	1,6
193	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,7	2,0	1,5
194	PE	Base	0,0	0,0	7,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	68,7	2,8	2,4
195	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,6	1,5	0,9
196	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,0	2,9	2,4
197	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,6	1,6	1,0
198	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,1	4,3	3,0
199	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,0	2,9	2,4
200	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	83,0	5,9	4,3
201	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,5	5,0	5,3
202	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,0	2,7	1,8
203	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,8	6,4	6,3
204	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	72,1	1,1	0,7
205	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,4	2,1	1,6
206	PE	Base	0,0	0,0	12,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	22,9	0,9	1,0
207	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,0	6,0	6,0
208	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	75,0	2,0	1,5
209	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	84,5	2,7	1,7
210	PE	Base	0,0	0,0	20,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	58,4	2,6	2,4
211	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,5	5,9	4,4
212	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,1	2,7	2,2
213	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	81,3	6,8	6,2
214	PE	Base	0,0	0,0	21,2	9,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,0
215	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	51,8	1,0	1,0
216	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	31,7	1,7	1,6
217	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	23,5	1,6	1,6
218	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	13,2	0,9	0,9
219	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,5	1,2	1,2

220	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	15,6	1,6	3,5
221	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	6,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	37,1	0,0	0,0
222	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	18,5	0,0	0,0
223	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	12,3	0,7	0,6
224	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,7	0,5	0,5
225	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	12,5	1,2	1,2
226	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	37,2	2,0	1,8
227	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	1,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	20,4	1,6	1,6
228	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	17,4	1,2	1,0
229	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	22,4	1,3	1,3
230	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,9	0,0	0,0
231	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	25,4	0,4	0,4
232	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,6	0,3	0,3
233	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	14,9	0,6	0,6
234	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	14,2	1,2	2,4
235	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	27,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	30,7	0,0	0,0
236	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	14,9	1,0	1,4
237	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	39,7	2,2	3,4
238	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	38,7	2,1	2,5
239	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	40,4	3,2	3,2
240	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	37,5	3,3	3,3
241	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	15,2	1,4	1,4
242	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	43,3	2,3	1,9
243	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	18,5	1,7	1,7
244	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	44,5	3,1	3,6
245	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,9	1,0	1,0
246	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	33,3	1,1	2,6
247	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	19,3	1,3	1,3

248	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,8	0,4	0,4
249	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	16,6	1,7	2,6
250	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,0	0,9	0,8
251	MT	HCl	0,0	0,0	14,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	21,3	1,3	1,3
252	MT	HCl	0,0	0,0	15,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	21,3	1,4	1,4
253	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	19,2	1,4	1,4
254	MT	HCl	0,0	0,0	4,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	21,3	1,3	1,3
255	MT	HCl	0,0	0,0	5,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	12,4	0,7	0,7
256	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	96,5	0,4	0,4
257	MT	Base	0,0	0,0	3,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,4	0,3	0,0
258	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	53,8	5,0	5,2
259	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	33,0	1,7	1,7
260	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	17,6	2,4	2,4
261	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	28,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	29,6	0,0	0,0
262	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	94,3	0,0	0,0
263	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	95,5	1,9	1,8
264	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,8	0,4	0,3
265	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	19,7	0,0	0,0	0,0	20,3	0,0	0,0
266	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	34,5	3,0	2,6
267	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	44,7	2,7	2,7
268	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	21,7	2,0	2,0
269	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	95,4	1,4	1,1
270	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	54,8	5,2	5,5
271	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	13,4	1,2	1,2
272	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,3	0,4	0,4
273	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	39,7	3,4	4,2
274	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	21,8	1,8	1,8
275	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	11,2	0,8	0,8

276	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	56,0	4,1	5,2
277	MT	Base	0,0	0,0	30,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	57,9	2,3	3,1
278	MT	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	94,2	0,0	0,0
279	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	34,0	3,6	4,0
280	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	39,4	2,0	1,6
281	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	37,5	1,6	1,6
282	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	37,3	1,9	1,9
283	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	39,7	2,7	2,7
284	MT	Base	0,0	0,0	1,6	0,0	0,0	2,1	0,0	0,0	0,0	0,0	20,5	1,5	1,3
285	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	42,8	2,6	2,6
286	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	33,9	2,4	2,4
287	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	36,0	1,3	1,3
288	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	56,2	0,5	0,5
289	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	30,4	1,6	1,1
290	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	39,3	2,4	2,4
291	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	38,9	2,5	2,5
292	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	33,6	2,3	2,3
293	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	36,1	2,1	2,1
294	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	30,3	1,7	1,2
295	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	31,5	3,0	3,0
296	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	26,6	2,6	2,6
297	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	37,6	1,6	1,6
298	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	45,2	3,0	2,3
299	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	50,3	4,0	6,0
300	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	42,8	2,7	2,8
301	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	48,6	4,0	6,4
302	MT	Base	0,0	0,0	31,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	52,0	2,3	3,1
303	MT	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	35,9	2,9	2,9



332	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	11,1	3,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	14,4	0,0	0,0
333	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	22,3	4,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,0	0,0	0,0
334	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	2,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,0	0,5	0,4
335	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	3,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,8	0,5	0,4
336	SP	ND	0,0	0,0	0,0	8,3	10,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
337	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	23,2	28,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	12,9	0,5	0,4
338	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	83,0	0,0	0,3
339	SP	ND	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
340	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	37,6	23,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	23,5	0,3	0,3
341	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	37,8	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,4	0,2	0,2
342	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	14,5	2,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	30,0	0,0	0,0
343	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	26,2	22,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	17,8	1,1	1,1
344	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	48,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	10,3	0,7	0,6
345	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	23,4	21,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	12,2	0,5	0,5
346	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	6,3	12,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,1	0,0	0,3
347	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	25,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	14,8	0,9	0,9
348	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	20,5	3,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	12,8	0,0	0,0
349	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	95,7	1,1	1,5
350	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	15,0	21,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,8	0,8	0,7
351	SP	ND	0,0	0,0	0,0	80,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
352	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	15,3	35,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,5	0,4	0,4
353	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	10,7	18,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,7	0,4	0,7
354	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	22,2	27,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	12,0	0,6	0,6
355	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	17,6	2,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	37,4	0,0	0,0
356	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	33,2	12,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	10,5	0,0	0,0
357	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	16,9	24,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	21,2	0,3	0,3
358	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	53,7	1,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	22,0	0,0	0,0
359	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	16,1	5,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	17,9	0,0	0,0

360	SP	Base	0,0	0,0	0,0	37,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	13,7	0,9	0,9
361	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	10,3	4,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	42,8	1,1	0,9
362	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	33,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	18,2	0,0	0,0
363	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	26,3	1,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	11,6	0,0	0,0
364	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	98,4	1,0	1,3
365	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	21,9	13,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,8	0,4	0,6
366	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	19,1	16,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	14,3	0,7	0,7
367	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	33,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,4	0,5	0,5
368	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	47,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	10,9	0,6	0,8
369	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	28,3	16,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	13,5	1,0	1,0
370	SP	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,0	0,0	0,0	0,0	0,0	97,2	1,1	0,9
371	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	81,4	4,6	4,4
372	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	82,9	6,1	4,5
373	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,5	4,8	4,8
374	SP	Base	0,0	0,0	9,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	71,9	5,3	4,7
375	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	63,8	4,8	5,2
376	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	83,7	4,4	4,6
377	SP	ND	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
378	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,5	5,8	5,4
379	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,3	6,0	5,1
380	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,1	5,8	5,8
381	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	72,6	6,9	7,3
382	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,1	7,9	7,9
383	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,3	0,0	0,0	0,0	0,0	82,2	6,3	5,7
384	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,4	3,9	4,2
385	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,3	5,4	4,0
386	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,9	5,8	5,0
387	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,3	6,9	9,8

388	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,0	5,2	4,1
389	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,4	5,5	4,4
390	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	81,3	5,2	4,4
391	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,2	6,1	5,6
392	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,6	5,8	5,7
393	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,5	8,3	6,7
394	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,8	5,4	5,0
395	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,2	6,4	5,7
396	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,4	6,5	4,9
397	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,0	5,9	4,5
398	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,0	5,6	5,3
399	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,3	6,3	4,9
400	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,6	6,2	5,7
401	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,8	7,8	7,8
402	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	82,5	3,8	2,4
403	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,3	6,8	6,0
404	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,1	5,7	4,7
405	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,3	6,5	7,0
406	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	82,0	5,9	4,9
407	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,6	6,4	6,1
408	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,4	0,0	0,0	0,0	0,0	78,4	5,9	6,3
409	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,3	7,8	7,4
410	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,8	6,8	5,5
411	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,2	4,8	4,5
412	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,4	0,0	0,0	0,0	0,0	80,5	6,5	5,8
413	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,5	6,9	5,8
414	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	81,1	6,2	5,9
415	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,2	5,8	7,2

416	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	83,7	6,3	5,4
417	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	83,2	6,4	5,4
418	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,1	5,4	4,7
419	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,8	7,3	6,4
420	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,0	4,9	4,4
421	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,3	7,9	6,7
422	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,7	7,3	6,7
423	SP	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,0	5,8	5,6

**ANEXO B- COMPOSIÇÃO DAS 95 AMOSTRAS DE COCAÍNA APREENDIDAS E ANALISADAS POR NIR UTILIZADAS NO CONJUNTO DE VALIDAÇÃO DOS MODELOS**

amostra	Estado	forma (hcl; base; mistura; n.d.)	Concentração (%)												
			benzocaina	fenacetina	cafeína	lidocaina	teor aminopirina	teor levamisol	teor procaína	teor hidroxizina	teor diltiazem	cocaína	teor cis- cinamolicocaína	teor trans- cinamolicocaína	cocaína cloridrato
1	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,0	0,0	0,0	3,0
2	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,1	0,0	0,0	1,1
3	PE	HCl	0,0	0,0	13,6	4,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,7	0,0	0,0	1,7
4	PE	HCl	0,0	0,0	36,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	39,1	0,7	0,7	39,1
5	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,9	0,0	0,0	0,9
6	PE	HCl	0,0	0,0	59,0	2,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,4	0,0	0,0	3,4
7	PE	HCl	0,0	2,3	45,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	19,7	0,0	0,0	19,7
8	PE	HCl	0,0	2,3	45,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	19,7	0,0	0,0	19,7
9	PE	HCl	0,0	2,3	45,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	19,7	0,0	0,0	19,7
10	PE	HCl	0,0	2,3	45,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	19,7	0,0	0,0	19,7
11	PE	HCl	0,0	2,3	45,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	19,7	0,0	0,0	19,7
12	PE	HCl	0,0	0,0	20,4	19,4	0,0	4,0	0,0	0,0	0,0	45,2	0,7	0,8	45,2
13	PE	HCl	0,0	0,0	79,3	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,5	0,0	0,0	7,5
14	PE	HCl	0,0	0,0	59,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	36,5	0,5	0,5	36,5
15	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,9	0,0	0,0	0,9
16	PE	HCl	0,0	0,0	21,7	9,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	26,1	0,4	0,4	26,1
17	PE	HCl	0,0	0,0	69,6	3,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,2	0,0	0,0	4,2
18	PE	HCl	0,0	6,8	68,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,3	0,0	0,8	4,3
19	PE	HCl	0,0	0,0	61,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,1	0,0	0,0	2,1
20	PE	HCl	0,0	0,0	9,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,2	0,0	0,0	1,2
21	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	95,9	1,4	1,3	95,9

22	PE	HCl	0,0	0,0	11,7	28,8	0,0	4,5	0,0	0,0	0,0	7,5	0,4	0,5	7,5
23	PE	HCl	0,0	2,5	67,8	1,0	0,0	1,7	0,0	0,0	0,0	19,9	0,2	2,2	19,9
24	PE	HCl	0,0	0,0	25,2	1,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,1	0,0	0,0	4,1
25	PE	HCl	0,0	0,0	18,4	15,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	21,9	0,0	0,0	21,9
26	PE	HCl	0,0	0,0	6,6	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	30,6	0,5	0,5	30,6
27	PE	HCl	0,0	0,0	6,3	1,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	27,9	0,4	0,5	27,9
28	PE	HCl	0,0	0,0	20,0	9,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	28,3	0,4	0,4	28,3
29	PE	HCl	0,0	0,0	12,3	30,6	0,0	4,2	0,0	0,0	0,0	8,4	0,5	0,5	8,4
30	PE	HCl	0,0	0,0	2,6	1,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	12,0	1,7	1,3	12,0
31	PE	HCl	0,0	0,0	19,0	15,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	20,1	0,0	0,0	20,1
32	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,4	0,3	0,3	4,4
33	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,4	0,3	0,3	4,4
34	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,4	0,3	0,3	4,4
35	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,4	0,3	0,3	4,4
36	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,4	0,3	0,3	4,4
37	PE	HCl	0,0	0,0	81,9	1,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,6	0,0	0,0	6,6
38	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,3	0,3	0,3	2,3
39	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,8	0,0	0,0	0,8
40	PE	HCl	0,0	0,0	82,8	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,2	0,0	0,0	7,2
41	PE	HCl	0,0	0,0	41,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	38,6	0,7	0,7	38,6
42	PE	HCl	0,0	0,0	19,8	8,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	20,3	0,3	0,3	20,3
43	PE	HCl	0,0	0,0	37,7	1,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	19,6	0,3	0,3	19,6
44	PE	HCl	0,0	0,0	18,3	16,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	22,2	0,0	0,0	22,2
45	PE	HCl	0,0	0,0	23,1	1,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,7	0,0	0,0	1,7
46	PE	HCl	0,0	0,0	3,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	15,3	0,0	0,0	15,3
47	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	1,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	44,9	0,7	0,7	44,9
48	PE	HCl	0,0	1,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	14,6	1,0	0,7	14,6
49	PE	HCl	0,0	0,0	77,6	3,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,8	0,0	0,0	5,8

50	PE	HCl	0,0	0,0	12,6	30,7	0,0	4,4	0,0	0,0	0,0	8,0	0,5	0,6	8,0
51	PE	HCl	0,0	0,0	70,6	4,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0	1,5
52	PE	HCl	0,0	0,0	62,2	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,0	0,0	0,0	6,0
53	PE	HCl	0,0	0,0	31,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	13,5	0,3	0,4	13,5
54	PE	HCl	0,0	0,0	5,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,3	0,0	0,0	5,3
55	PE	HCl	0,0	0,0	3,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,7	0,0	0,0	1,7
56	PE	HCl	0,0	0,0	26,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,7	0,0	0,0	1,7
57	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	12,1	0,2	0,2	12,1
58	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	57,7	0,0	0,0	0,0	41,8	0,0	0,0	41,8
59	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	93,4	0,0	0,0	93,4
60	PE	HCl	0,0	20,5	25,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	10,7	0,0	0,0	10,7
61	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,3	0,0	0,0	4,3
62	PE	HCl	0,0	0,0	12,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,4	0,0	0,0	5,4
63	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	56,7	1,0	1,1	56,7
64	PE	HCl	0,0	0,0	11,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
65	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	32,9	0,3	0,3	32,9
66	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
67	PE	HCl	0,0	0,0	74,3	0,0	0,0	1,7	0,0	0,0	0,0	8,3	0,0	0,0	8,3
68	PE	HCl	0,0	96,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
69	PE	HCl	0,0	0,0	52,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,0	0,0	0,0	5,0
70	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	23,8	0,3	0,4	23,8
71	PE	HCl	0,0	0,0	22,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,5	0,0	0,0	2,5
72	PE	HCl	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
73	PE	Base	0,0	0,0	6,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	23,5	0,5	0,3	0,0
74	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	65,4	3,3	3,5	0,0
75	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,2	4,8	4,5	0,0
76	PE	Base	0,0	0,0	1,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	70,6	5,7	5,7	0,0
77	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	64,9	4,7	4,7	0,0

78	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	83,1	7,5	7,5	0,0
79	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	75,7	6,1	4,6	0,0
80	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	54,7	4,1	4,7	0,0
81	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	74,6	6,6	6,6	0,0
82	PE	Base	0,0	18,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	60,7	4,6	3,4	0,0
83	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	75,5	4,2	4,4	0,0
84	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	75,7	5,2	5,2	0,0
85	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	78,8	6,4	6,0	0,0
86	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	84,4	3,9	2,6	0,0
87	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	70,2	3,6	2,7	0,0
88	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	79,2	5,8	5,5	0,0
89	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,0	6,7	5,2	0,0
90	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	80,7	4,7	4,2	0,0
91	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,1	3,2	2,5	0,0
92	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	73,2	4,1	4,4	0,0
93	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	71,6	3,8	3,8	0,0
94	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	77,6	6,5	6,2	0,0
95	PE	Base	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	76,1	5,3	5,5	0,0

## ANEXO C- 45 AMOSTRAS NEGATIVAS QUANTO A COCAÍNA

amostra	nome	concentração (%)			
		MDA	MDMA	cafeína	presença de cafeína
1	MDMA-P40	0.0	40.0	0.0	não
2	CELULOSE	0.0	0.0	0.0	não
3	AMIDO	0.0	0.0	0.0	não
4	AMINOPIRINA	0.0	0.0	0.0	não
5	CAFEÍNA	0.0	0.0	98.1	sim
6	META-241-22-02	0.0	0.0	0.0	não
7	PROCAÍNA	0.0	0.0	0.0	não
8	ALANINA	0.0	0.0	0.0	não
9	ESTEARATO-Mg	0.0	0.0	0.0	não
10	FOSFATO-Ca	0.0	0.0	0.0	não
11	LACTOSE	0.0	0.0	0.0	não
12	SORBITOL	0.0	0.0	0.0	não
13	TALCO	0.0	0.0	0.0	não
14	Buscopan	0.0	0.0	N.D.	não
15	Cimegripe	0.0	0.0	N.D.	não
16	Dipirona	0.0	0.0	N.D.	não
17	Doralgina	0.0	0.0	N.D.	sim
18	Dorflex	0.0	0.0	N.D.	sim
19	Doril	0.0	0.0	N.D.	sim
20	Engov	0.0	0.0	N.D.	sim
21	Enxak	0.0	0.0	N.D.	sim
22	Flanax	0.0	0.0	N.D.	não
23	Histamin	0.0	0.0	N.D.	não
24	Ibuprofeno	0.0	0.0	N.D.	não
25	Lacto-Purga	0.0	0.0	N.D.	não
26	Loratadina	0.0	0.0	N.D.	não
27	Neosaldina	0.0	0.0	N.D.	sim
28	Nimesulida	0.0	0.0	N.D.	não
29	Novalgina	0.0	0.0	N.D.	não
30	Toragesic	0.0	0.0	N.D.	não
31	Torsilax	0.0	0.0	N.D.	sim
32	Tylenol	0.0	0.0	0.0	não
33	Ácido Bórico	0.0	0.0	0.0	não
34	Benzocaína	0.0	0.0	0.0	não
35	BHT	0.0	0.0	0.0	não
36	CLOBENZOREX	0.0	0.0	0.0	não
37	Diltiazem	0.0	0.0	0.0	não
38	Fenacetina	0.0	0.0	0.0	não
39	Hidroxizina	0.0	0.0	0.0	não
40	IRGANOX	0.0	0.0	0.0	não
41	IRGANOX1010	0.0	0.0	0.0	não

42	IRGANOX1076	0.0	0.0	0.0	não
43	Levamisol	0.0	0.0	0.0	não
44	Lidocaína	0.0	0.0	0.0	não
45	TETRACÁINA	0.0	0.0	0.0	não