

DOI: <https://doi.org/10.33994/kndise.2022.67.39>
УДК 343.98:615.074:543.06

Дмитро Юрійович Шинкаренко
головний судовий експерт
сектору фізико-хімічних досліджень
відділу досліджень матеріалів, речовин та виробів

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1400-6131>
E-mail: dimashyn91@gmail.com

Інна Сергіївна Конопацька
головний судовий експерт
сектору дослідження наркотичних засобів,
психотропних речовин їх аналогів та прекурсорів
відділу досліджень матеріалів, речовин та виробів

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8067-8740>
E-mail: innakonopatcka@gmail.com

Роман Володимирович Цинда
старший судовий експерт
сектору дослідження наркотичних засобів,
психотропних речовин їх аналогів та прекурсорів
відділу досліджень матеріалів, речовин та виробів

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8425-112X>
E-mail: rollbazen@gmail.com

Костянтин Петрович Король
завідувач сектору
дослідження наркотичних засобів, психотропних речовин
їх аналогів та прекурсорів
відділу досліджень матеріалів, речовин та виробів

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5253-232X>
E-mail: bertolar@ukr.net

*Черкаський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр
Міністерства внутрішніх справ України*

Олег Олексійович Посільський
кандидат хімічних наук, завідувач відділу
досліджень матеріалів, речовин та виробів
лабораторії криміналістичних видів досліджень

E-mail: vmr-lkd@ukr.net

*Київський науково-дослідний інститут судових експертиз
Міністерства юстиції України*

ЕКСПЕРТНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ РЕЧОВИН ГРУПИ ПОХІДНИХ ФЕНІЛЕТИЛАМІНУ (НА ПРИКЛАДІ МЕСКАЛІНУ ТА 2С-В)

В статті представлені результати аналізу використання фізико-хімічних методів для якісної ідентифікації та кількісного дослідження похідних фенілетиламіну, на прикладі мескаліну та 2С-В, в об'єктах судової експертизи.

Значна кількість речовин, що мають властивості, аналогічні наркотичним засобам або психотропним речовинам, з'являється зі швидкістю, яка не дозволяє оперативно на законодавчому рівні реагувати на ситуацію.

Ключові слова: фенілетиламін, мескалін, 2С-В, хроматографія, спектрофотометрія, хромато-мас-спектроскопія.

Постановка проблеми. За оцінками експертів на території України з початку 2010-х років стрімко збільшився незаконний обіг речовин напівсинтетичної та синтетичної природи. Ситуація погіршується всупереч нормативним документам дотримання яких контролюють правоохоронні органи на державному рівні, а саме закону України «Про обіг в Україні наркотичних засобів, психотропних речовин їх аналогів і прекурсорів» від 15.02.1995, закону України «Про заходи протидії незаконному обігу наркотичних засобів, психотропних речовин і прекурсорів та зловживання ними» від 15.02.1995, постанови Кабінету Міністрів України № 770 від 06.05.2000 «Про перелік наркотичних засобів, психотропних речовин і прекурсорів», наказу Міністерства охорони здоров'я України № 188 від 01.08.2000 «Про затвердження таблиць невеликих, великих та особливо великих розмірів наркотичних засобів, психотропних речовин і прекурсорів, які знаходяться у незаконному обігу».

Значна кількість речовин, що мають властивості, аналогічні наркотичним засобам або психотропним речовинам, з'являється зі швидкістю, яка не дозволяє оперативно на законодавчому рівні реагувати на ситуацію.

До однієї з груп речовин, які мають властивості, аналогічні наркотичним засобам або психотропним речовинам, відносяться похідні фенілетиламіну (2-фенілетиламіну, фенетиламіну, β -фенілетиламіну, 1-аміно-2-феніл-етану) – хімічної сполуки, початкової для багатьох природних нейромедіаторів.

Загальна характеристика фенілетиламіну. Фенілетиламін – кристалічна речовина білого кольору (рис. 1) або масляниста рідина, що погано розчиняється у воді (4.2 мл в 100 мл води) та добре в органічних розчинниках (діетиловому ефірі, етанолі, тощо) [1].



Рис. 1. Зовнішній вигляд фенілетиламіну у вигляді кристалічної речовини

В загальному, органічні сполуки на основі структури фенілетиламіну можуть бути утворені шляхом заміни або заміщення одного або декількох атомів водню в структурі ядра фенілетиламіну замісниками (рис. 2).

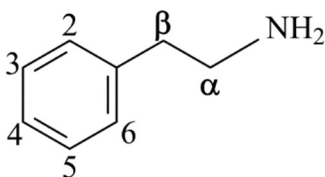


Рис. 2. Структурна формула фенілетиламіну

Похідні фенілетиламіну розділяють за лінійними індексами хроматографічного утримання (J) відносно гомологічного ряду алканів нормальної будови (табл. 1) та за певними особливостями мас-спектрів речовин, а саме:

- пік молекулярного іону у сполуках малоінтенсивний;
- пік основного іону відповідає аміну, від'єданому за вуглеводневим зв'язком в положенні α - β ;
- два малоінтенсивних піки відповідають ароматичним фрагментарним іонам, що утворюються під час розриву молекул за вуглеводневим зв'язком в положеннях α - β та 1- β [2].

Більшість цих речовин є галюциногенами та стимуляторами центральної нервової системи, а тому заборонені до вільного обігу в більшості розвинених країн та підлягають заходам контролю на території України. До таких речовин можна віднести мескалін та 2С-В.

Брутто-формули, молекулярні маси (М, а.о.м.) та індекси хроматографічного утримання (J) похідних фенолетиламіну [2]

№	Скорочена назва	Повна назва	Формула	М		J
1	Метилон, бк-MDMA	2-Метиламіно-1-(3,4-метилендіоксифеніл)пропан-1-он	C ₁₁ H ₁₃ N O ₃	207		1721
2	Мефедрон, 4-MMC	1-(4-Метилфеніл)-2-метиламінпропан-1-он	C ₁₁ H ₁₅ N O	177		1462
3	MDPV	3,4-Метилендіоксипірова-лерон	C ₁₆ H ₂₁ N O ₃	275		2177
4	3-FMC	2-Метиламіно-1-(3-фторфеніл)пропан-1-он	C ₁₀ H ₁₂ FN O	181		1327
5	Бутилон, бк-MBDB	2-Метиламіно-1-(3,4-метилендіоксифеніл)бутан-1-он	C ₁₂ H ₁₅ N O ₃	221		1801
6	2C-C	4-Хлоро-2,5-діметоксифенілетиламін	C ₁₀ H ₁₄ Cl NO ₂	215		1760
7	4-MEC	1-(4-Метилфеніл)-2-етиламінпропан-1-он	C ₁₂ H ₁₇ N O	191		1528
8	PVP	1-Феніл-2-піролідин-1-ілпентан-1-он	C ₁₅ H ₂₁ N O	231		1790
9	MPPP	4-Метил-&-піролідинопропіофенон	C ₁₄ H ₁₉ N O	217		1772
10	Пентилон, бк-MBDP	1-(1,3-Бензодіоксол-5-іл)-2-метиламінпентан-1-он	C ₁₃ H ₁₇ N O ₃	235		1883
11	Пентедрон	2-(Метиламіно)-1-фенілпентан-1-он	C ₁₂ H ₁₇ N O	191		1502
12	Метедрон, бк-PMMA	1-(4-Метоксифеніл)-2-(метиламін)пропан-1-он	C ₁₁ H ₁₅ N O ₂	193		1653
13	Мескалін	3,4,5-триметоксифенетиламін	C ₁₁ H ₁₇ N O ₃	211		1686
14	2C-I	4-Йодо-2,5-діметоксифенетиламін	C ₁₀ H ₁₄ IN O ₂	307		1945
15	2C-B	4-Бromo-2,5-діметоксифенетиламін	C ₁₀ H ₁₄ Br NO ₂	259		1841
16	PMMA	Пара-метоксиметамфетамін	C ₁₁ H ₁₇ N O	179		1448
17	MDPBP	3',4'-Метилендіокси-&-піролідинобутирофенон	C ₁₅ H ₁₉ N O ₃	261		2108
18	pFA	Пара-фторамфетамін	C ₉ H ₁₂ FN	153		1145

Загальна характеристика мескаліну. Мескалін – природний рослинний галюциноген (високоактивна речовина, яка потрапляючи до людського

організму діє на мозкові центри і центральну нервову систему, викликає звукові та візуальні галюцинації), алкалоїд ряду фенілетиламінів. В невеликій кількості міститься в кактусах виду *Lophophora Williamsii* (ареал зростання Мексика) (рис. 3) [3].



Рис. 3. Кактуси виду *Lophophora Williamsii*

Синтетичний аналог мескаліну в умовах лабораторії вперше було отримано в 1898 р. німецьким хіміком Хеффером. У хімічному відношенні являє собою 3,4,5-триметоксифенетиламін $C_{11}H_{17}NO_3$, молекулярна маса основи становить 211.257 г/моль, а гідрохлориду – 247.7 г/моль (рис. 4) [4].

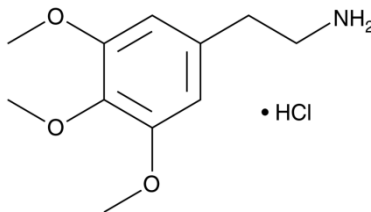


Рис. 4. Структурна формула мескаліну

Загальна характеристика 2С-В. 2С-В – синтетичний галюциноген групи 2С, вперше синтезований в 1974 р. Олександром Шульгінім. Володіє контрольованими психостимулюючими ефектами, що в залежності від прийнятої дози схожі за ефектами до амфетаміну, MDMA або LSD [5, 6].

У хімічному відношенні 2С-В являє собою 4-бромо-2,5-диметоксифенетиламін $C_{10}H_{14}BrNO_2$, молекулярна маса основи становить 260.13 г/моль, а гідрохлориду – 296.6 г/моль (рис. 5) [7].

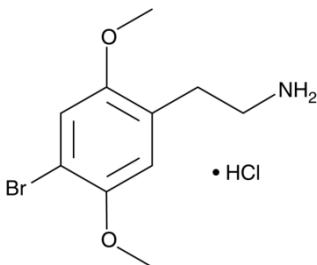


Рис. 5. Структурна формула 2С-В

Відповідно до «Переліку наркотичних засобів, психотропних речовин і прекурсорів» затвердженого Постановою Кабінету Міністрів № 770 від 06.05.2000 – мескалін віднесено до особливо небезпечних психотропних речовин, обіг яких заборонено (табл. 1, списку № 2), 2С-В віднесений до психотропних речовин, обіг яких обмежено (табл. 2, списку № 2).

Незважаючи на це, вказані речовини все частіше вилучаються з нелегального обігу на території України та стають об'єктами судової експертизи. Як результат, перед експертами постає проблема якісної ідентифікації об'єктів дослідження, що мають схожу молекулярну структуру.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Аналітичний підхід, призначений для ідентифікації досліджуваних речовин, передбачає використання декількох не пов'язаних між собою методів: методи категорії А для забезпечення високого рівня селективності, категорії В – середнього рівня селективності, категорії С – низького рівня селективності (табл. 2) [14].

Таблиця 2

Категорії аналітичних методів

<p>Категорія А (найвища селективність)</p>	Молекулярна спектроскопія в ІЧ-діапазоні
	Мас-спектроскопія
	ЯМР (ядерно-магнітний резонанс) спектроскопія
	Раман-спектроскопія
	Рентгенофлуоресцентний аналіз (РФА)
	Емісійний спектральний аналіз
<p>Категорія В (середня селективність)</p>	Газова хроматографія
	Спектрометрія іонної рухливості
	Мікрокристалічні тести
	Високоєфективна рідинна хроматографія
	Тонкошарова хроматографія

Продовження табл. 2

	Ультрафіолетова/видима спектроскопія (повний) спектр)
	Макроскопічне дослідження
	Морфологічне дослідження (мікроскопія)
Категорія С (найнижча селективність)	Якісні (кольорові) реакції
	Флуоресцентна спектроскопія
	Рефрактометрія
	Люмінесцентний аналіз
	Поляризаційні дослідження

Варто зазначити, що існує низка інших методів, описаних у спеціальній літературі із судової експертизи, які також дають змогу отримувати достовірні результати та можуть застосовуватися на розсуд експерта. У конкретному випадку залежно від можливостей лабораторії можна обирати й інші методи дослідження, проте їх комбінація повинна відповідати міжнародній практиці.

Застосовувати комбінацію аналітичних методів для досягнення науково обґрунтованого результату необхідно за схемою: категорії В + А; категорії А + С; категорії С + В + В; категорії С + В + А.

Рекомендовано дотримуватися таких вимог застосування аналітичних методів:

- у разі використання методу категорії А необхідно застосовувати щонайменше один інший метод категорії А, В або С;

- якщо метод категорії А не застосовується, слід використовувати щонайменше три різних методи (два з яких повинні бути категорії В);

- отримані дані результатів аналітичних вимірювань, якщо можливо, необхідно порівнювати з результатами вимірювання еталонного матеріалу (стандартного зразка), який був проаналізований у тих самих умовах;

- використовувати щонайменше дві окремі вибірки для паралельного дослідження;

- у разі використання комбінованих методів (ГХ-МС тощо) їх необхідно розглядати як окремі методи (категорія А + категорія В).

Аналітична схема дає науково обґрунтований результат, коли за кожним методом досягаються позитивні результати, що підтверджують один одного.

Необхідно пам'ятати, що використання методу категорії А не забезпечує достатнього рівня селективності в разі дослідження речовин подібних за своєю структурою, а також у разі недостатньої кількості проби або малої концентрації діючої речовини в аналізі.

У таких випадках метод все ще може становити частину аналітичної схеми, за умови, що невідповідності усуваються шляхом використання іншого методу в схемі, який забезпечуватиме загальний рівень селективності, необхідний для дослідження [14].

Мета дослідження. Метою дослідження даної роботи є аналіз та апробація існуючих методик ідентифікації речовин, що мають схожу молекулярну структуру, та їх кількісне дослідження.

Матеріали, інструменти та методики дослідження. Дослідження проводили у 2021 р. на базі лабораторії відділу досліджень матеріалів, речовин та виробів Черкаського науково-дослідного експертно-криміналістичного центру Міністерства внутрішніх справ України. Для вирішення поставленої мети об'єктами дослідження було обрано порошкоподібну речовину, що містить в своєму складі особливо небезпечну психотропну речовину, обіг якої заборонено – мескалін та порошкоподібну речовину, що містить в своєму складі психотропну речовину, обіг якої обмежено – 2С-В.

В якості стандартних зразків використовували метанольні розчини мескаліну та 2С-В з концентрацією речовини 1.01 мг/см³ та 1.00 мг/см³, відповідно, отримані із колекції Черкаського НДЕКЦ МВС України.

Для якісної ідентифікації мескаліну та 2С-В використовували:

- газовий хроматограф Shimadzu GC 2010 Plus (ГХ) з мас-селективним детектором GCMS-QP2020 EI (МСД). Хроматографічна колонка Rxi-5-MS (30.0 м, 0.250 мм, 0.25 мкм);

- UV-VIS спектрометр THERMO «HELIOS γ»;

- інфрачервоний Фур'є – спектрометр Thermo Fisher Scientific Nicolet 380 FT-IR.

Для здійснення процесу екстракції та центрифугування з подальшою фільтрацією використовували ультразвукову ванну (УЗВ) і центрифугу ОПн-8.

Для приготування розчинів та для виконання аналізу використовувався стандартизований скляний мірний посуд.

В процесі пробопідготовки та дослідження використано методики [8, с. 12-17] та [9, с. 18-33].

Викладення основного матеріалу.

Дослідження методом якісних аналітичних реакцій.

Для виявлення імовірної присутності в досліджуваній речовині мескаліну та 2С-В проводили кольорову реакцію з реактивом Маркі. Для цього наважку речовини (або декілька крапель рідини) поміщали у заглиблення планшетки для крапельних реакцій та додавали по краплі реактив Маркі до зміни забарвлення [8, 9].

Наявність в об'єкті дослідження мескаліну додатково можна перевірити за допомогою тесту Лібермана. Для цього наважку речовини (або декілька крапель рідини) поміщали у заглиблення планшетки для крапельних реакцій та додавали по краплі реактив [10].

Результати, отримані методом якісних аналітичних реакцій, наведені в табл. 3.

У випадках коли досліджувані речовини, мають забарвлення, що заважає більшості крапельних реакцій (наприклад, колір таблетки відповідає кольору реакції), дані речовини потребують попередньої пробопідготовки – одним із варіантів якої є підготовка екстракту з подальшим його випарювання до сухого залишку на поверхні білої фарфорової пластинки. Отриманий розчин можна

використовувати для подальших досліджень. Слід наголосити, що дані кольорові реакції вказують лише на *можливу присутність* мескаліну та 2С-В в досліджуваних об'єктах.

Таблиця 3

Результати кольорових реакцій

Речовина	Тест	Колір реакції
Мескалін	Маркі	помаранчеве → помаранчево-червоне
	Лібермана	чорне
2С-В	Маркі	жовте → зелене

Дослідження методом тонкошарової хроматографії.

Для проведення дослідження наважки досліджуваних речовин розчиняли у метанолі. Отримані розчини, а також розчини стандартних зразків, наносили на стартову лінію хроматографічної пластини «Merck TLC Silica gel 60 F₂₅₄». Для надійної ідентифікації мескаліну та 2С-В хроматографування проводили в системах:

I. метанол : 25 % розчин аміаку (100:1.5);

II. хлороформ : метанол : 25 % розчин аміаку (82:17:1) [8];

III. хлороформ : етанол : діетиламін (9:1:1).

Після підняття лінії фронту розчинника на лінію фінішу, пластинки виймали з камер, підсушували при кімнатній температурі (або в потоці теплого повітря) до повного зникнення запаху розчинника. З метою детектування хроматографічних зон досліджуваних речовин пластинки оглядали в ультрафіолетових (далі – УФ) променях кварцової лампи при довжині хвилі 312 нм, виявляючи при цьому зони гасіння флуоресценції УФ-випромінювання. Далі пластинки проявляли реактивом Маркі або 10 % розчином нінгідрину в етанолі. При нанесенні розчину нінгідрину пластинку витримували при температурі 70 °С не менше 10-15 хвилин. Орієнтовні значення коефіцієнтів хроматографічної рухливості (Rf) для пластин «Merck TLC Silica gel 60 F₂₅₄» наведені в табл. 4.

Таблиця 4

Орієнтовні значення Rf речовин

Речовина	Системи розчинників			Забарвлення	
	I	II	III	Реактив Маркі	Розчин нінгідрину
Мескалін	0.07	0.31	0.25	помаранчеве	фіолетове
2С-В	0.10	0.31	0.35	жовте → зелене	фіолетове

Варто зазначити, що при використанні, як проявника, 10 %-го розчину нінгідрину та візуалізацію результатів в УФ-променях, потрібно

користуватися системою III, яка є більш специфічною для досліджуваних речовин. При використанні як проявника реактиву Маркі зони чітко відрізняються за кольором. Наведені значення можуть змінюватися в залежності від умов навколишнього середовища, партій реактивів, хроматографічних пластин та інших факторів.

Дослідження методом ультрафіолетової спектроскопії.

З метою встановлення молекулярного складу об'єктів дослідження проводилося дослідження методом молекулярного абсорбційного аналізу в УФ-області спектра. Для цього репрезентативні наважки речовин масою по 0.025 г, переносили в мірні колби. До першої колби додавали 25.0 см³ 0.1 н хлоридної кислоти та проводили розчинення наважки на ультразвуковій ванні впродовж 30 хв. До другої колби додавали 25.0 см³ метанолу та проводили розчинення наважки на ультразвуковій ванні впродовж 30 хв. Отримані розчини центрифугували для відділення нерозчинних домішок при 5000 об/хв. на центрифугі ОПн-8. Після центрифугування по 4 см³ розчини поміщували до кварцових кювет та проводили дослідження за спектрами поглинання в ультрафіолетовій (УФ) області. УФ-спектри реєстрували на спектрометрі THERMO «HELIOS γ» за наступних умов:

- ширина кювети 1.0 см
- спектральний крок 0.5 нм
- швидкість сканування 200 нм/хв.
- діапазон довжин хвиль 200-400 нм

Розшифрування зареєстрованих УФ-спектрів проводили з використанням програмного пакету «VISIONlite scan version 2.1».

В результаті проведеного дослідження встановили:

– на УФ-спектрі, знятому в слабко кислому середовищі, виявлено максимум поглинання при довжині хвилі 268 нм, який за літературними даними [11] характерний для мескаліну (рис. 6 табл. 6);

Таблиця 5

Молекулярні УФ-спектри речовин

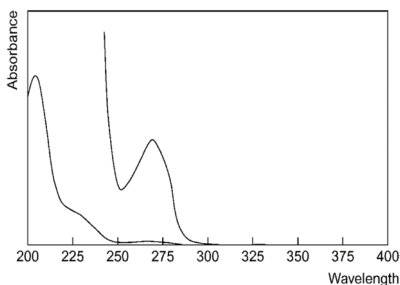


Рис. 6. УФ-спектр мескаліну

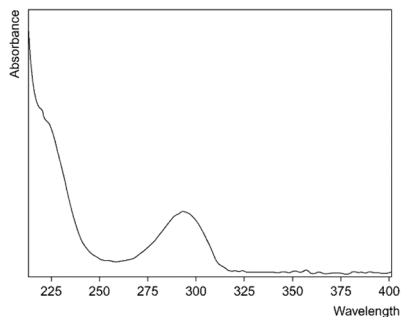


Рис. 7. УФ-спектр 2С-В

– на УФ-спектрі, знятому в нейтральному середовищі, виявлено максимум поглинання при довжині хвилі 296 нм, який за літературними даними [11] характерний для 2С-В (рис. 7 табл. 6);

– за рахунок схожої молекулярної структури мескалін та 2С-В мають схожі УФ-спектри, що не дозволяє використовувати метод як специфічний;

– похідні фенілетиламіну дають схожі результати, тому метод молекулярного абсорбційного аналізу в УФ-області спектра не рекомендується для їх якісної ідентифікації.

Дослідження методом інфрачервоної (далі – ІЧ) спектроскопії.

З метою встановлення молекулярного складу об'єктів дослідження проводилося методом ІЧ-спектроскопії. Для цього невелику кількість речовин поміщували по черзі на кристал приставки ППВВ (порушеного повного внутрішнього відбиття) та проводили знімання за наступних умов:

приставка ППВВ	Smart Performer (кристал – Zn/Se)
діапазон реєстрації спектра	4000-650 cm^{-1}
кількість сканів	32
програмне забезпечення	Omnipic

Розшифрування зареєстрованих ІЧ-спектрів проводили за бібліотекою ІЧ-спектрів з використанням програмного пакету «EZ OMNIC 7.4.127».

В результаті проведеного дослідження встановили:

– отримали молекулярний ІЧ-спектр речовини, зі смугами поглинання (1127 cm^{-1} , 1242 cm^{-1} , 1592 cm^{-1} , 996 cm^{-1} , 1513 cm^{-1} , 834 cm^{-1}), які за наявністю та відносною інтенсивністю є характерними для мескаліну (рис. 8 табл. 6);

– отримали молекулярний ІЧ-спектр речовини, зі смугами поглинання (1250 cm^{-1} , 1500 cm^{-1} , 825 cm^{-1} , 740 cm^{-1} , 750 cm^{-1}), які за наявністю та відносною інтенсивністю є характерними для 2С-В (рис. 9 табл. 6) [11].

Таблиця 6

Молекулярні ІЧ-спектри речовин

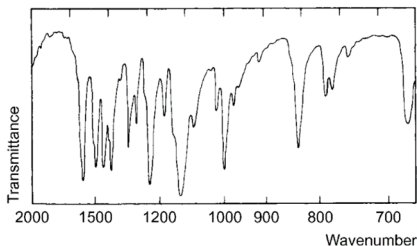


Рис. 8. ІЧ-спектр мескаліну

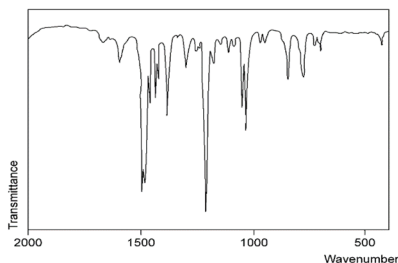


Рис. 9. ІЧ-спектр 2С-В

Дослідження методом газової хромато-мас-спектрометрії.

З метою встановлення якісного складу, від об'єктів дослідження відбирали репрезентативні наважки масою по 0.005 г, перенесли в скляні

флакони та розчиняли у метанолі об'ємом 5 см³ на ультразвуковій ванні впродовж 30 хв. Отримані розчини центрифугували для відділення нерозчинних домішок при 5000 об/хв. на центрифугі ОПн-8. Після центрифугування по 1 см³ розчинів переносили до віал та досліджували за допомогою газового хроматографа «Shimadzu GC 2010 Plus» з мас-селективним детектором «GCMS-QP2020 EI» за наступних умов (табл. 7) [10, 12]:

Таблиця 7

Робочі умови газового хроматографа з мас-детектором

Газовий хроматограф	Shimadzu GC 2010 Plus
Режим вводу проби	з поділом потоку (Split)
Поділ потоку газу-носія	20:1
Об'єм проби	1 мкл
Температурна програма термостата хроматографа	100 °С (тримати 3 хв.), нагрів 15 °С/хв. до 260 °С (тримати 1 хв.)
Газ-носіє	Гелій
Потік газу-носія через колонку	1.2 мл/хв.
Подача газу-носія	Постійна
Колонка	Rxi-5-MS, кат. № 13423
Довжина, діаметр, товщина покриття	30.0 м * 0.250 мм * 0.25 мкм
Мас-селективний детектор (МСД)	GCMS-QP2020 EI
Режим роботи МСД	за повним іонним струмом (TIC) діапазон сканування 35-450 а.о.м.
Затримка для виходу розчинника	3.00 хв.
Температура іонного джерела	230 °С
Температура інжектора	250 °С
Температура інтерфейсу	280 °С

По закінченні хроматографічного дослідження проводили аналіз хроматограм за допомогою програмного забезпечення LabSolutions GCMS solutions Version 4.45 SP1 із використанням мас-спектральних баз даних NIST, SWGDRUG.

В результаті проведеного дослідження встановили:

– на хроматограмі об'єкта дослідження виявлено пік речовини із часом утримання RT = 9.659 хв., мас-спектр якої ідентифіковано як мескалін (Mescaline) (рис. 10, 11 табл. 8) [11, 13];

– на хроматограмі об'єкта дослідження виявлено пік речовини із часом утримання RT = 10.420 хв., мас-спектр якої ідентифіковано як 2С-В (рис. 12, 13 табл. 8) [11, 13].

У випадках коли досліджувані речовини, мають забарвлення, що заважає більшості крапельних реакцій (наприклад, колір таблетки відповідає кольору реакції), дані речовини потребують попередньої пробопідготовки – одним із варіантів якої є підготовка екстракту з подальшим його випарювання до сухого залишку на поверхні білої фарфорової пластинки. Отриманий розчин можна використовувати для подальших досліджень. Слід

наголосити, що дані кольорові реакції вказують лише на *можливу присутність* мескаліну та 2С-В в досліджуваних об'єктах.

Таблиця 8

Хроматограми та мас-спектри речовин

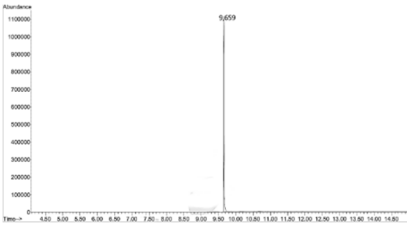


Рис. 10. Хроматограма мескаліну

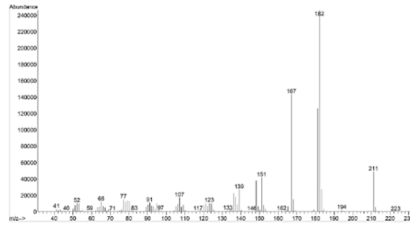


Рис. 11. Мас-спектр мескаліну

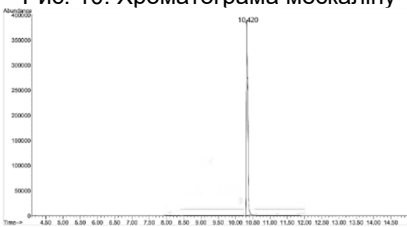


Рис. 12. Хроматограма 2С-В

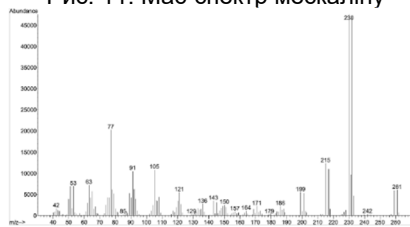


Рис. 13. Мас-спектр 2С-В

Кількісне визначення мескаліну та 2С-В проводилося методом газової хромато-мас-спектрометрії [12]. Для визначення маси від попередньо гомогенізованих у фарфорових ступках об'єктів дослідження відбирали по дві репрезентативні наважки, які розчиняли у 10.0 см³ метанолу на ультразвуковій ванні впродовж 30 хв. Отримані розчини центрифугували для відділення нерозчинних домішок при 5000 об/хв. на центрифугі ОПн-8. Після центрифугування по 1.0 см³ розчинів переносили до віал та досліджували за допомогою газового хроматографа з мас-селективним детектором за описаних вище умов (див. табл. 7).

При тих же умовах проводили хроматографування стандартних розчинів мескаліну у метанолі (концентрація основи 1.01 мг/см³) та 2С-В у метанолі (концентрація основи 1.00 мг/см³).

Вміст досліджуваної речовини розраховували за формулою 1 [12]:

$$\omega = \frac{c_{\text{ст.}}}{c_{\text{д.р.}}} \cdot \frac{S_{\text{д.р.}}}{S_{\text{ст.}}} \cdot 100\% \quad (1)$$

де:

ω – процентний вміст діючої речовини, %;

$\omega_{\text{ст}}$ – концентрація розчину стандартного зразку діючої речовини, мг/см³;

$\omega_{\text{д.р.}}$ – відношення маси наважки досліджуваної речовини до об'єму екстрагента, мг/см³;

$S_{\text{д.р.}}$ – площа піку досліджуваної речовини, у.о.;

$S_{\text{ст}}$ – площа піку стандартного зразку діючої речовини, у.о.

Масу досліджуваної речовини в наданій на дослідження речовині розраховували за формулою 2 [12]:

$$m_{\text{д.р.}} = \frac{\omega * m_{\text{заг}}}{100\%} \quad (2)$$

де:

$m_{\text{д.р.}}$ – маса діючої речовини у наданій на дослідження речовині, г;

ω – процентний вміст діючої речовини, %;

$m_{\text{заг}}$ – маса речовини, що надана на дослідження, г.

Висновки.

1. Процес якісної ідентифікації мескаліну та 2С-В, або інших похідних фенілетиламіну, включає в себе: екстракцію та пробопідготовку об'єктів дослідження; попереднє дослідження методом якісних аналітичних реакцій; дослідження методом тонкошарової хроматографії (ТШХ); дослідження інструментальними методами, зокрема ІЧ-спектроскопією та газовою хроматографією з мас-селективним детектуванням.

2. Наведений у статті алгоритм дослідження мескаліну та 2С-В, або інших похідних фенілетиламіну, дозволяє точно та швидко провести якісну ідентифікацію діючої речовини в об'єктах дослідження.

3. Запропоновано метод кількісного визначення діючої речовини в об'єктах дослідження за допомогою методу газової хромато-мас-спектрометрії.

Незважаючи на проведення дослідження, слід зазначити, що вказаний перелік приладової бази, методів та методик дослідження не є вичерпним. Експерту слід керуватися наявністю відповідних літературних джерел та наявністю відповідної аналітичної апаратури (газовий хроматограф, газовий хроматограф з мас-селективним детектором, рідинний хроматограф, рідинний хроматограф з мас-селективним детектором тощо). У відповідності до цього потрібно використовувати ті чи інші методики дослідження речовин. Вказані методики підлягають обов'язковій верифікації перед застосуванням в лабораторії.

Перелік посилань

1. Електронний довідник Cayman chemical. URL: <https://www.caymanchem.com/product/14206/2-phenethylamine> (станом на 02.09.2021).
2. Нехорошев С. В., Моисеева О. И. Хроматомасс-спектрометрическая

References

1. Cayman chemical electronic reference book. Retrieved from: <https://www.caymanchem.com/product/14206/2-phenethylamine> (as of 02.09.2021). (in Ukrainian).
2. Nekhoroshev, S. V., Moiseeva, O. I. (2012). Chromatomass-spectrometric

идентификация производных фенилэтиламина и её значение для обеспечения государственного контроля за оборотом новых психоактивных веществ. *Вестник Югорского государственного университета*. 2012. Вып. 3 (26). С. 41-44.

3. Что такое мескалин (наркотик). URL: <http://vsezavisimosti.ru/narkomaniya/vidy-i-stadii/chto-takoe-meskalin-narkotik.html>. (станом на 02.09.2021).

4. Електронний довідник Cayman chemical. URL: [https://www.caymanchem.com/product/11950/mescaline-\(hydrochloride\)](https://www.caymanchem.com/product/11950/mescaline-(hydrochloride)). (станом на 02.09.2021).

5. Eshleman A. J., Forster M. J., Wolfrum K. M. et al. Behavioral and neurochemical pharmacology of six psychoactive substituted phenethylamines: mouse locomotion, rat drug discrimination and in vitro receptor and transporter binding and function. *Journal Psychopharmacology*. 2014. Vol. 231. P. 875-888.

6. Shulgin A. T., Shulgin A. Pihkal: a chemical love story. *Transform Press, Berkeley*. 1991. 978 p.

7. Електронний довідник Cayman chemical, ознайомитись за адресою. URL: [https://www.caymanchem.com/product/11734/2c-b-\(hydrochloride\)](https://www.caymanchem.com/product/11734/2c-b-(hydrochloride)). (станом на 02.09.2021).

8. Рекомендуемые методы анализа кактуса пейоте (мескалиновых пуговиц) / мескалина и псилоцибиновых грибов/ псилоцибина. ST/NAR/19. *Руководство для национальных лабораторий экспертизы наркотиков* / ООН. Отдел по наркотическим средствам. Нью-Йорк, 2005.

9. Рекомендуемые методы обнаружений и анализа амфетамина, метамфетамина и их замещённых по циклу аналогов в конфискованных материалах. ST/NAR/34. *Руководство для национальных лабораторий экспертизы наркотиков*: ООН. Отдел по наркотическим средствам. Нью-Йорк, 2007.

identification of derivatives of phenylethylamine and its importance for ensuring state control over the circulation of new psychoactive substances. *Bulletin of the Ugra State University*. Issue 3 (26). P. 41-44. (in Russian).

3. What does mescaline mean (a drug)? Retrieved from: <http://vsezavisimosti.ru/narkomaniya/vidy-i-stadii/chto-takoe-meskalin-narkotik.html> (as of 02.09.2021). (in Russian).

4. Cayman chemical electronic reference book. Retrieved from: <https://www.caymanchem.com/product/14206/2-phenethylamine> (as of 02.09.2021). (in Ukrainian).

5. Eshleman, A. J., Forster, M. J., Wolfrum K. M. et al. (2014). Behavioral and neurochemical pharmacology of six psychoactive substituted phenethylamines: mouse locomotion, rat drug discrimination, and in vitro receptor and transporter binding and function. *Journal Psychopharmacology*. Vol. 231. P. 875-888. (in English).

6. Shulgin, A. T., Shulgin, A. (1991). Pihkal: a chemical love story. *Transform Press, Berkeley*. 978 p. (in English).

7. Cayman chemical electronic reference book. Retrieved from: <https://www.caymanchem.com/product/14206/2-phenethylamine> (as of 02.09.2021). (in Ukrainian).

8. Recommended methods of analysis of peyote cactus (mescaline buttons)/ mescaline and psilocybin fungi/ psilocybin. ST/NAR/19. *Guide for National Drug Testing Laboratories*/ United Nations. Department of Narcotic Drugs. New York. 2005. (in Russian).

9. Recommended methods of detection and analysis of amphetamine, methamphetamine, and their cycle-substituted analogs in confiscated materials. ST/NAR/34. *Guide for National Drug Testing Laboratories*: UN. Department of Narcotic Drugs. New York. 2007. (in Russian).

10. Шимановський С. О., Машкін В. Т., Замошець О. П., Семенова І. В. Дослідження наркотиків, поширених на території України: метод. рек. / МВС України. Київ, 1997. (Реєстру методик проведення судових експертиз; 8.6.47).
10. Shymanovskiy, S. O., Mashkin, V. T., Zamoshets, O. P., Semenova, I. V. (1997). Research of drugs common in Ukraine: methodological recommendations. Kyiv. (Register of methods of forensic examinations; 8.6.47). (in Ukrainian).
11. Clarke's Analysis of Drugs and Poisons / Third Ed. Ed. By A. C. Moffat, M. D. Osselton, B. Widdop. London-Chicago, 2004.
11. Moffat, A. C., Osselton, M. D., Widdop, B. (Eds.). (2004). Clarke's Analysis of Drugs and Poisons. London-Chicago. (in English).
12. Стандартна операційна процедура SOP.DSE.19/124/2-5.4-4.02 «Якісне та кількісне дослідження наркотичних засобів, психотропних речовин їх аналогів та прекурсорів методом газової хромато-мас-спектрометрії» відділу ДМПВ Черкаського НДЕКЦ МВС України.
12. Standard operating procedure SOP.DSE.19/124 / 2-5.4-4.02 "Qualitative and quantitative study of narcotic drugs, psychotropic substances of their analogs and precursors by gas chromat-mass spectrometry". Cherkasy State Scientific Research Forensic Center of the Ministry of Internal Affairs of Ukraine. (in Ukrainian).
13. Maurer H. H., Pflieger K., Weber A. A. Mass Spectral and GC data of Drugs, Poisons, Pesticides, Pollutans and Their Metabolites. 5th, revised and enlarged ed. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. Department of Experimental and Clinical Toxicology Saarland University 66421 Homburg (Saar), Germany 2017.
13. Maurer, H. H., Pflieger, K., Weber, A. A. (2017). Mass Spectral and GC Data of Drugs, Poisons, Pesticides, Pollutants and Their Metabolites. 5th revised and enlarged ed. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. Department of Experimental and Clinical Toxicology Saarland University 66421 Homburg (Saar), Germany. (in English).
14. Минимальные требования идентификации конфискованных наркотиков: документ для возникающих лабораторий / Международ. судебный стратегический альянс IFSA. Октябрь 2014.
14. Minimum requirements for the identification of confiscated drugs: a document for emerging laboratories/ International Forensic Strategic Alliance. October 2014. (in Russian).

EXPERT RESEARCH OF SUBSTANCES OF GROUP OF DERIVATIVES OF PHENYLETHYLAMINE (ON EXAMPLE OF Mescaline AND 2C-B)

**D. Shynkarenko
I. Konopatska
R. Tsynda
K. Korol
O. Posilskyy**

General physical and chemical descriptions of phenylethylamine presented gross-formulas, the molecular masses and indexes of chromatography maintenance of derivatives of phenylethylamine, register in the article, mescaline, and 2C-B behave to that.

During expert research of substances of a group of derivatives of phenylethylamine, the task of quality authentication of research objects that have an alike molecular structure stands before experts.

The analytical approach intended for authentication of the investigated substances envisages the use of a few unconnected inter se methods: methods of providing of high level of selectivity, middle and subzero level of selectivity.

The brought analytical charts over, that give a scientifically reasonable result, when after every method positive result that confirms each other are arrived at.

The aim of the research of this work is an analysis and approbation of existent methodologies of authentication of substances that have an alike molecular structure, and their quantitative research. The process of quality authentication of mescaline and 2C-B, or other derivatives of phenylethylamine, includes for itself extraction and preparation of the test. During realization of screening of the investigated psychotropic substances (mescaline, 2C-B) used: method of quality analytical reactions, method of TLC, method of ultraviolet spectroscopy, method of infra-red spectroscopy, method of gas mass-spectrometry. Quantitative determination of mescaline and 2C-B was conducted by the method of gas mass-spectrometry.

At the research of substances of a group of derivatives to the phenylethylamine expert, it follows to follow the presence of corresponding literary sources and the presence of corresponding analytical equipment (GC, GC/MS, LC/MS, and others like that). In accordance with it, it's needed to use those or other methodologies of research of substances. The indicated methodologies are subject to obligatory verification before application in a laboratory.

Key words: phenylethylamine, mescaline, 2C-B, chromatography, spectrophotometry, chromato-mass spectroscopy.