

О. С. Зав'ялов, П. О. Зелений

Державний науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС України

O. S. Zavalov, P. O. Zelenyi

State Scientific Research Forensic Centre, MIA of Ukraine

ОСОБЛИВОСТІ ДОСЛІДЖЕННЯ 3,4-МЕТИЛЕНДІОКСИПІРОВАЛЕРОНУ ТА РОЗРІЗНЕННЯ МОЖЛИВИХ ЙОГО СУМІШЕЙ ІЗ МЕТАДОНОМ І КОКАЇНОМ

THE FEATURES OF 3,4-METHYLENEDIOXYPYROVALERONE STUDY AND THE DIFFERENTIATION OF ITS POSSIBLE MIXTURES WITH METHADONE AND COCAINE

Окреслено особливості дослідження 3,4-метилендіоксипіровалерону за допомогою якісних хімічних реакцій, тонкошарової хроматографії, газорідинної хроматографії з мас-селективним і полум'яно-іонізаційним детектуванням, рідинної хроматографії з мас-спектрометричним детектуванням. Уточнено його загальну характеристику, фізичні та хімічні властивості; акцентовано увагу на відмінностях 3,4-метилендіоксипіровалерону, метадону та кокаїну під час дослідження методами якісних хімічних реакцій і тонкошарової хроматографії. Обґрунтовано результати експериментальних даних щодо зміни забарвлення під час якісних хімічних реакцій трьох речовин із сімома реагентами. Виокремлено результати проведення двох реакцій щодо ідентифікації метадону і трьох – щодо визначення кокаїну. Засвідчено характерну особливість 3,4-метилендіоксипіровалерону, що проявляється на пластині для тонкошарової хроматографії в ультрафіолетовому світлі (254 і 366 нм) та дає змогу висунути припущення стосовно можливих речовин. Висвітлено результати експериментальних даних хроматографування в чотирьох системах для тонкошарової хроматографії, що дозволяють отримати максимальну різницю значень Rf між метадоном, кокаїном та 3,4-метилендіоксипіровалероном.

Ключові слова: 3,4-метилендіоксипіровалерон; метадон; кокаїн; якісні хімічні реакції; тонкошарова хроматографія; газорідинна хроматографія; рідинна хроматографія.

Определены особенности исследования 3,4-метилендиоксипировалерона с помощью качественных химических реакций, тонкослойной хроматографии, газожидкостной хроматографии с масс-селективным и пламенно-ионизационным детектированием, жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием. Уточнены его общая характеристика, физические и химические свойства; акцентировано внимание на различиях 3,4-метилендиоксипировалерона, метадона и кокаина во время исследования методами качественных химических реакций и тонкослойной хроматографии. Обоснованы результаты экспериментальных данных по изменению окраски при качественных химических реакциях трех веществ с семью реагентами. Выделены результаты проведения двух реакций по идентификации метадона и трех – по определению кока-

ина. Описана характерная особенность 3,4-метилендиоксипировалерона, что проявляется на пластине для тонкослойной хроматографии в ультрафиолетовом свете (254 и 366 нм) и позволяет выдвинуть предположение о возможных веществах. Представлены результаты экспериментальных данных хроматографирования в четырех системах для тонкослойной хроматографии, позволяющие получить максимальную разницу значений Rf между метадонном, кокаином и 3,4-метилендиоксипировалероном.

Ключевые слова: 3,4-метилендиоксипировалерон; метадон; кокаин; качественные химические реакции; тонкослойная хроматография; газо-жидкостная хроматография; жидкостная хроматография.

The authors outline features of 3,4-methylenedioxypropylvalerone study using qualitative chemical reactions, thin-layer chromatography, gas-liquid chromatography with mass-selective and flame-ionization detection, liquid chromatography with mass spectrometric detection in this article. Its general characteristic, physical and chemical properties are specified; as well as the attention was focused on the differences in the 3,4-methylenedioxypropylvalerone, methadone and cocaine during the study by methods of qualitative chemical reactions and thin-layer chromatography. The results of experimental data on color change during qualitative chemical reactions of three substances with seven reagents are substantiated. The results of two reactions to the identification of methadone and three to the definition of cocaine were singled out. The article shows the characteristic feature of 3,4-methylenedioxypropylvalerone, which appears on the plate for thin-layer chromatography in ultraviolet light (254 and 366 nm), and allows us to make assumptions about possible substances. Moreover, the results of the experimental data of chromatography in four systems for thin-layer chromatography are, which make it possible to obtain the maximum difference of the Rf values between methadone, cocaine and 3,4-methylenedioxypropylvalerone.

Key words: 3,4-methylenedioxypropylvalerone; methadone; cocaine; qualitative chemical reactions; thin-layer chromatography; gas-liquid chromatography; liquid chromatography.

Незаконний обіг 3,4-метилендіоксипіровалерону (MDPV) і відповідно надходження на експертизу до підрозділів Експертної служби МВС зумовлює актуальність його дослідження, визначаючи нагальну необхідність у чіткій ідентифікації та розрізненні можливих його сумішей з метадонном та кокаїном, зокрема під час застосування якісних реакцій і тонкошарової хроматографії (ТШХ). Адже забарвлення, що виникає під час якісних хімічних реакцій із цими речовинами, може мало відрізнитись одне від одного. Крім того, згадані речовини в більшості хроматографічних систем мають близькі значення Rf. А отже використання таких методів дослідження потребує додаткової уваги та застосування ефективніших хроматографічних систем розділення, що допоможуть розрізнити MDPV.

Як свідчить аналіз, літературних джерел з окресленої тематики, які експерти можуть використовувати під час досліджень, сьогодні недостатньо; деякі з них наведені наприкінці статті [1–5]. Бракує ї комплексної методики дослідження таких речовин, зумовлюючи необхідність синергії інформації про дослідження MDPV, метадону та кокаїну.

Мета статті – визначити особливості дослідження MDPV та розрізнення можливих його сумішей з метадонном та кокаїном при застосуванні якісних хімічних реакцій і ТШХ.

Метилендіоксипіровалерон являє собою особливо небезпечну психоактивну речовину синтетичного походження, обіг якої заборонений. Вона є похідною піровалерону (рис. 1), за дію на організм людини завдяки стимулювальним властивостям схожа на амфетамін і метамфетамін [6]. Дістала поширення останнім десятиліттям, хоча вперше її синтезовано ще в 1960-х рр. (рис. 2).

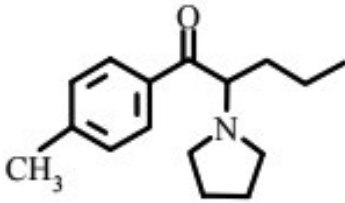


Рис. 1. Структурна формула піровалерону

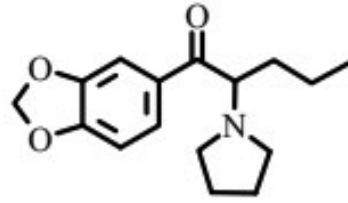


Рис. 2. Структурна формула MDPV

Сьогодні MDPV пов'язують із поняттям «дизайнерський наркотик», оскільки його синтезують з піпероналю (геліотропіну) (рис. 3). У медичній практиці не застосовують із 1960-х рр., оскільки вважають одним із найгірших лікарських засобів, що викликає проблему залежності та зловживання [7; 8]. У результаті дослідження в 2013 р. встановлено, що дія MDPV у кілька разів сильніша за метамфетамін; він також набагато токсичніший за нього.

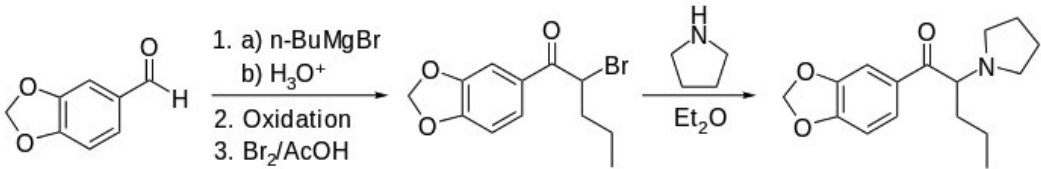


Рис. 3. Схема синтезу MDPV з піпероналю

Із 2012 р. так звані дизайнерські наркотики масово розповсюджуються за допомогою Інтернету.

Досвід експертної практики засвідчує, що експерт, досліджуючи MDPV або суміші з метадоном чи кокаїном, має послуговуватися достатньою кількістю методів, щоб бути впевненим в отриманих результатах. У разі застосування таких методів, як якісні хімічні реакції і ТШХ потрібно використовувати специфічні розчинники, які забезпечують найбільшу різницю їх значень Rf (співвідношення відстані між центром зони та лінією старту до відстані між лініями старту та фронту).

За морфологічними ознаками MDPV трапляється переважно у вигляді гідрофільного розсипчастого порошку, від чисто білого до світло-коричневого кольору (залежно від домішок). Добре розчинний у воді. У разі тривалого перебування на відкритому повітрі набуває запаху картоплі. Жаргонна назва – «сіть», «швидкість».

Через нестабільність краще виділяється під час синтезу у вигляді відповідних гідрохлоридних або гідробромідних солей, а тому в незаконному обігу трапляється переважно у вигляді гідрохлориду – гігроскопічного кристалічного порошку, що нагадує цукрову пудру або муку, рідше – у вигляді капсул чи таблеток [9]. До визначення підконтрольною речовиною реалізовувався як «солі для ван». Основними країнами-виробниками та постачальниками є Китай, Індія та Пакистан.

MDPV можна нюхати, курити, вводити в організм людини перорально, а також внутрішньовенно (останній спосіб практикують наркозалежні особи).

Активна доза MDPV – 3–5 мг, типова, яку вживають наркозалежні особи, – 5–20 мг [10]. Реакцією організму людини на вживання MDPV є прискорене серцебиття, підвищення артеріального тиску, звуження судин, потовиділення, безсоння, збу-

дження, занепокоєння, відчуття зменшення потреби в їжі та відпочинку. Великі дози можуть викликати тривалі напади паніки, а в людей із підвищеною чутливістю до стимуляторів – психози, відсутність сну, галюцинації. Після вживання MDPV настає постеефект, схожий на вживання метамфетаміну, який характеризується депресією, млявістю, головним болем, занепокоєнням, запамороченням, слабкістю м'язів, а в деяких випадках – почервонінням очей (яке зазвичай спадає упродовж 4–8 год). Також може з'явитися біль у животі разом із нирковим болем. Ефект від вживання речовини короточасний і триває від 3 до 6 год, після чого часто-густо відбувається прийом нової дози [11; 12].

Під час криміналістичного дослідження відбір проб слід проводити відповідно до принципів аналітичної хімії, зважаючи на морфологію об'єктів дослідження.

Результати застосування методу якісних хімічних реакцій дають змогу висунути припущення про можливу присутність MDPV у досліджуваному об'єкті.

Для проведення крапельних реакцій слід помістити кілька аліквотних частинок досліджуваної речовини в лунки керамічної планшетки білого кольору та послідовно (кілька крапель на вибір) додавати реактиви:

1. Роданід кобальту (реагент 1) [1; 2].

Під час підготовки до проведення реакцій потрібно приготувати:

- 1) розчин, що містить 2–4 г роданіду кобальту (II), до якого додають 100 мл дистильованої води або метилового спирту;

- 2) фосфорну кислоту;

- 3) 1 г платинохлористоводневої кислоти, розчиненого у фосфорній кислоті – $\text{H}_2\text{PtCl}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ в 20 мл H_3PO_4 .

Для проведення реакції слід змішати 9 частин розчину 1), 3 частини фосфорної кислоти 2), 1 частину розчину 3) і ретельно перемішати їх, додати 9 частин дистильованої води та знову перемішати. Розчин готовий до використання, коли його забарвлення перейде у рожевий колір.

2. Реактив Лібермана: 10-процентний розчин нітрату натрію в концентрованій сірчаній кислоті (реагент 2) [1].

3. Реактив Манделіна: 0,5–1-процентний розчин ванадату амонію в концентрованій сірчаній кислоті (реагент 3) [3].

4. Реактив Мекке: 0,5–1-процентний розчин триоксиду селену в концентрованій сірчаній кислоті (реагент 4).

5. Реактив з галовою кислотою: 0,5-процентний розчин галової кислоти в концентрованій сірчаній кислоті (реагент 5).

6. Реактив Фреде: 0,5–1-процентний розчин молібдату (амонію) натрію в концентрованій сірчаній кислоті (реагент 6).

7. Реактив Маркі: концентрована сульфатна кислота, що містить формальдегід (реагент 7).

Спостерігаючи за змінами забарвлення (табл. 1) у результаті реакції зазначених реактивів із MDPV, а також з метадоном і кокаїном, які можуть заважати ідентифікації досліджуваного об'єкта в разі їх суміші, фіксують їх.

Для підтвердження чи спростування отриманих результатів якісних хімічних реакцій провадять окремі реакції на метадон і кокаїн. У такому разі здійснюють цільове дослідження цих речовин, послуговуючися спеціальною, у тому числі методичною, літературою.

Забарвлення як результат якісних хімічних реакцій

Реагент	Забарвлення, яке спостерігають		
	MDPV	Метадон	Кокаїн
1	Синій/фіолетовий	Яскравий зелено-блакитний	Синій/блакитний*
2	Жовтий/зелений	Коричнево-помаранчевий	Жовтий
3	Зелено-коричневий	Темний сіро-блакитний	Реакція відсутня
4	Жовтий/червоно-коричневий	Зелений/коричневий	Те саме
5	Жовтий	Реакція відсутня	«
6	Яскраво-жовтий	Те саме	«
7	Салатовий/ яскраво-жовтий	«	«

*Поява синього кольору після додавання до проби краплі кислоти засвідчує, що зразок містить кокаїн у формі основи.

Так, досліджуючи метадон, можна провести одну з таких якісних хімічних реакцій, додавши до наважок цієї речовини масою по 1 мг:

кілька крапель реактиву (10 мл льодяної оцтової кислоти та 8–10 крапель 40-процентного розчину формальдегіду) та кілька крапель концентрованої сульфатної кислоти (при цьому спостерігають появу рожевого забарвлення, яке поступово переходить у фіолетове);

суміш сірчаної та азотної кислоти (10 крапель концентрованої азотної кислоти та 10 мл концентрованої сірчаної кислоти). У результаті реакції спостерігають помаранчеве забарвлення, яке поступово переходить у червоне.

Для проведення реакцій на кокаїн потрібно:

розчинити близько 0,05 г досліджуваного зразка в 2,5 мл води та додати 4–5 крапель 1-процентного розчину перманганату калію ($KMnO_4$). За наявності кокаїну випадають кристали, забарвлені в червоно-фіолетовий колір;

до сухого залишку, отриманого після випарювання хлороформного розчину досліджуваної речовини, додати краплю 1н розчину соляної кислоти та краплю 10-процентного розчину платинохлористоводневої кислоти. За наявності кокаїну утворюються світло-жовті кристали, які мають форму перистих дендритів;

суміш 0,1 г досліджуваного зразка та 0,1 г каломелі ($HgCl_2$) розтерти у ступці. За наявності кокаїну після змочення водою або спиртом суміш чорніє, що є характерним для кокаїну, оскільки за наявності ртутних солей він розкладається до метилекгоніну, який під дією світла швидко окислюється до кетону з одночасним відновленням ртуті [5].

Для ідентифікації MDPV методом ТШХ наважку досліджуваної речовини з розрахунку 1–1,5 мг/мл (діючої речовини) екстрагують метанолом при кімнатній температурі. Отриманий екстракт разом зі стандартними зразками MDPV, метадону та кокаїну наносять на стартову лінію хроматографічної пластинки кількістю 5 мкл.

Як критерії для ідентифікації речовини використовують два незалежних параметри, тобто застосовують дві системи ТШХ з різними розчинниками або різними сорбентами нерухомих фаз пластинок (цього достатньо для ідентифікації досліджуваних речовин під час оцінки результатів). А отже для ідентифікації MDPV ме-

тодом ТШХ рекомендується проводити хроматографування паралельно у двох системах розчинників. У разі підозри щодо наявності MDPV для хроматографування можна використовувати такі системи розчинників:

- 1) метанол – 25-процентний аміак (100:1,5);
- 2) етилацетат – етанол – 25-процентний аміак (85:10:5);
- 3) толуол – ацетон – етанол – 25-процентний аміак (45:45:7,5:2,5);
- 4) бензол – етанол – діетиламін (9:1:1).

Після закінчення хроматографування пластинки сушать при кімнатній температурі або в потоці теплого повітря до повного видалення розчинника з їх поверхонь. Пластинки вивчають в УФ-світлі (254 нм), позначаючи олівцем зони гасіння люмінесценції. За наявності MDPV спостерігають темні зони на тлі світло-зеленої флуоресценції пластинки (рис. 4).

Однією з характерних відмінностей MDPV від метадону та кокаїну є світіння пластинки в УФ-світлі (366 нм) – зона MDPV світиться світло-зеленим кольором (люмінесценції інших сполук немає) (рис. 5).



Рис. 4. Вигляд хроматографічної пластинки з MDPV, метадоном та кокаїном в УФ-світлі (254 нм)

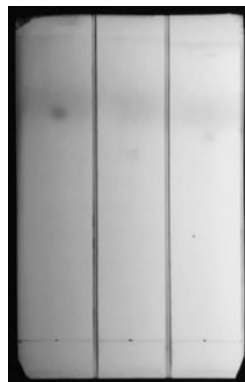


Рис. 5. Вигляд хроматографічної пластинки з MDPV, метадоном та кокаїном в УФ-світлі (366 нм)

Детектування виявлених зон проводять проявленням хроматографічної пластинки одним із запропонованих реагентів (див. табл. 1). У разі оброблення розчином нінгідрину реактив розпилюють на пластинку та нагрівають до температури 80 °С, після чого спостерігають появу забарвлених зон.

Для ідентифікації речовини враховують отримане значення R_f та колір зони після проявлення відповідним реагентом (табл. 2 і 3).

Також для проявлення пластинок можливе використання реагентів 2–7. При цьому забарвлення зон зразка має відповідати забарвленню розчинів стандартних зразків речовин (забарвлення хроматографічних зон у системі гексан – хлороформ – триетиламін (20:1:1) див. у табл. 3).

Для дослідження методом ТШХ слід підбирати як мінімум дві хроматографічні системи розчинників, які дозволяють забезпечити розділення MDPV, метадону та кокаїну, значення R_f яких мають відрізнитись один від одного якомога більше (оскільки при проявленні пластинок зазначені речовини мають схоже забарвлення, головним параметром для їх розрізнення є значення R_f). Для проведення дослідження доцільно користуватися даними, визначеними експериментально, які під-

тверджують, що наведені системи розчинників забезпечують найкраще розділення цих речовин між собою (табл. 4).

Таблиця 2

**Коефіцієнти хроматографічної рухливості MDPV
та забарвлення виявлених зон**

Система розчинників	Значення Rf	Забарвлення зони після обробки реактивами			
		Маркі	Co(SCN) ₂	Розчин нінгідрину	Йодолатинат
1	0,53	Світло-жовтий	Блакитний	Фіолетовий	Темно-фіолетовий
2	0,60				
3	0,75			Проявлення не відбувається	
4	0,89				

Таблиця 3

Забарвлення хроматографічних зон MDPV після хроматографування в системі гексан – хлороформ – триетиламін (20:1:1)

Сполука	Забарвлення хроматографічних зон після обробки реактивами				
	Маркі	Розчин нінгідрину	Манделіна	Фреде	Лібермана
MDPV	Жовтий	Світло-жовтий	Синьо-зелений	Жовто-коричневий	Зелено-коричневий

Таблиця 4

Порівняння значень Rf сполук у деяких системах ТШХ

Сполука	Система розчинників	Значення Rf			
		1	2	3	4
MDPV		0,53	0,60	0,75	0,89
Метадон		0,20	0,13	0,36	0,86
Кокаїн		0,59	0,16	0,58	0,85

На відміну від розглянутих методів (якісних хімічних реакцій і ТШХ) інструментальне дослідження методами газорідинної та рідинної хроматографії з метою ідентифікації та розрізнення MDPV і можливих його сумішей з метадоном та кокаїном зазвичай не викликає труднощів, проте з огляду на важливість достовірного кількісного дослідження MDPV та кваліфікованої оцінки отриманих результатів на цьому варто зупинитися докладніше.

Для дослідження використовують газовий хроматограф з мас-селективним детектуванням (ГХ-МС). Якісну ідентифікацію отримують за допомогою метанольного розчину з концентрацією ≈ 1 мг/мл (у перерахунку на діючу речовину).

Умови хроматографування:

капілярна колонка HP 19091S-433 (HP-5MS), довжина 30 м, діаметр 0,25 мм, фаза 0,25 мкм; постійний потік 1,5 мл/хв, газ-носії – гелій;
інжектор Split 20:1, температура випаровувача $T = 250\text{ }^{\circ}\text{C}$;
термостат $T_{\text{поч}} = 100\text{ }^{\circ}\text{C}$, утримання 2 хв, нагрівання – $15\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{хв}$, $T_{\text{кін}} = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$ (тримати 26 хв);

детектор мас-селективний, температура інтерфейсу $T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$, іонізація електронним ударом, енергія іонізації 70 еВ, температура іонного джерела $T = 230\text{ }^{\circ}\text{C}$; температура квадруполя $T = 150\text{ }^{\circ}\text{C}$;
об'єм інжектування 1,0 мкл.

Ідентифікацію з використанням ГХ-МС здійснюють порівнянням часу утримання і мас-спектра аналізу з аналогічними показниками еталона [13].

Результати хроматографування методом ГХ-МС наведено в табл. 5 і на рис. 6.

Таблиця 5

Результати хроматографування MDPV методом ГХ-МС

Сполука	Молекулярна маса	Орієнтований час утримання ГХ, хв	Основні іони ГХ-МС, m/z
MDPV	275,3	12,09	65,1; 96,1; 126,1; 149,0

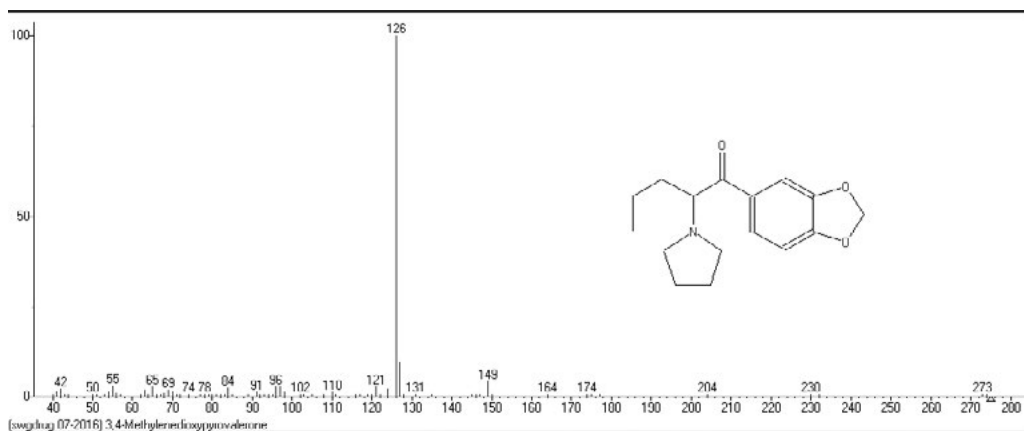
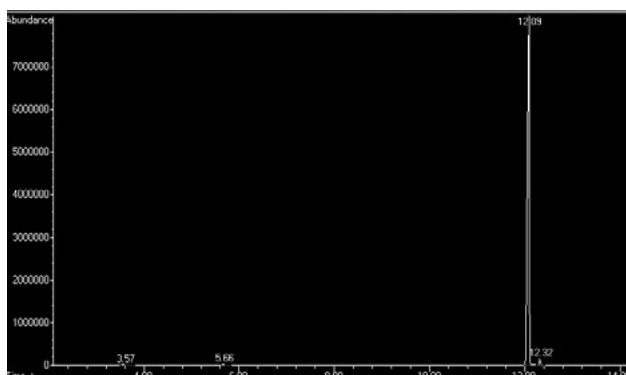


Рис. 6. Хроматограма та мас-спектр MDPV, отримані в результаті дослідження методом ГХ-МС

У разі використання методу газорідинної хроматографії для кількісного визначення MDPV від наданої на дослідження добре гомогенізованої речовини відбирають дві паралельні наважки масою по 2–2,5 мг, які для подальшої екстракції переносять у дві пробірки. Кожну наважку розчиняють у 2–3 мл 0,1н водного розчину гідроксиду натрію (калію) та поміщають до ультразвукової бані на 15 хв. До отриманих розчинів додають по 1 мл органічного екстрагенту (гептан, гексан), закривають пробірки та струшують упродовж 2–3 хв, центрифугують або залишають відстоюватися до повного розділення шарів. Після цього з пробірок максимально відбирають органічний шар. Процедура екстракції повторюють ще двічі, окремо об'єднуючи при цьому екстракти двох паралельних проб. Екстракти струшують для якіснішого змішування та відбирають від них аліквотні частини розчину для дослідження [4].

Хроматографування проводять за таких умов:

капілярна колонка HP 19091S-433 (HP-5MS), довжина 30 м, діаметр 0,25 мм, фаза 0,25 мкм; постійний потік 1,2 мл/хв, газ-носії – гелій;

інжектор Split 20:1, температура випаровувача $T = 250\text{ }^{\circ}\text{C}$;

термостат $T_{\text{поч}} = 100\text{ }^{\circ}\text{C}$, утримання 2 хв, нагрівання – $15\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{хв}$, $T_{\text{кін}} = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$ (тримати 10 хв);

детектор полум'яно-іонізаційний;

об'єм інжектування 1,0 мкл.

Після хроматографування розраховують концентрацію сполуки в наданому на дослідження об'єкті.

Високочутливим є й метод рідинної хроматографії з мас-спектрометричним детектуванням (PX-MS/MS). Він уможливує дослідження навіть у слідових кількостях MDPV. Його застосування забезпечує високу роздільну здатність аналітичного сигналу. Метод дає змогу отримати інформацію про речовину з часу її утримання в зазначених умовах, а також оцінити мас-спектр речовини та з урахуванням часу утримання чітко її ідентифікувати.

Для отримання досліджуваного зразка речовини таким методом готують метанольний розчин MDPV з концентрацією 1–1,5 мг/мл та екстрагують на ультразвуковій бані упродовж 15 хв. Для дослідження відбирають 0,1 мл отриманого метанольного екстракту сполуки та додають 0,9 мл метанолу. Цей розбавлений розчин сполуки використовують для дослідження.

Хроматографування проводять за таких умов:

прилад – вискоефективний рідинний хроматограф з мас-спектрометричним та коронорозрядним детектуванням LC/MS/CAD Agilent Technologies 1290 infinity/Q-TOF G6550A/Thermo Corona Veo RS;

колонка Poroshell 120 EC-C18 (довжина 150 мм, діаметр 2,1 мм, фаза 2,7 мкм); термостат $T = 40\text{ }^{\circ}\text{C}$, постійний потік – 0,500 мл/хв;

об'єм інжектування 1,0 мкл;

рухома фаза А – 0,1-процентний водний розчин мурашиної кислоти та 5 мМ форміату амонію;

рухома фаза В – 0,1-процентний метанольний розчин мурашиної кислоти;

градієнт – 20 % В – тримати 2 хв; з 2 хв по 6 хв – зміна градієнта В від 20 % до 80 %, 80 % градієнта В тримати 3 хв;

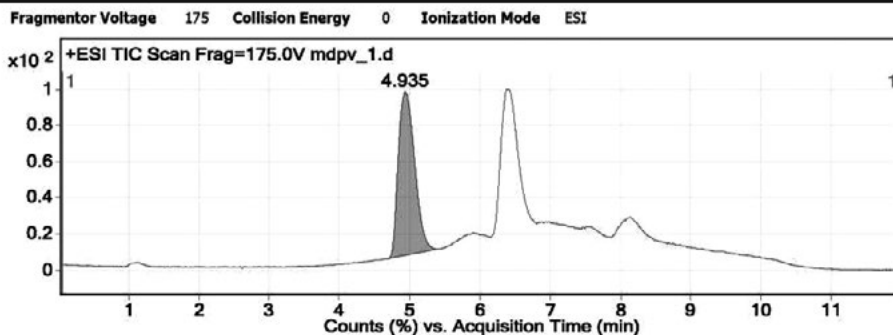
іонізація електроспреєм Dual AJS ESI;

полярність позитивна;

температура газу 125 °С;
 витрата газу 12 мл/хв;
 тиск в розпилювачі 30 psi;
 температура розпилювального газу 350 °С;
 витрата розпилювального газу 12 мл/хв;
 напруга на вході до капіляра 3500 В;
 напруга вихідного конуса 1000 В.

Ідентифікацію MDPV у цьому режимі отримання мас-спектра здійснюють за наявності протонованого ($M_r(MDPV)+H^+$) молекулярного іона з $m/z = 276^+$ (рис. 7). Після цього розраховують концентрацію сполуки в наданому на експертизу об'єкті.

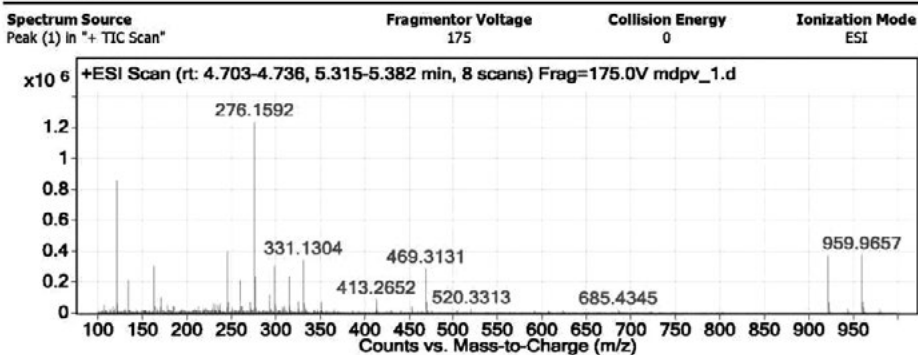
User Chromatograms



Integration Peak List

Peak	Start	RT	End	Height	Area	Area %
1	4.698	4.935	5.395	376859557.5	6114292350	100

User Spectra



Peak List

m/z	z	Abund
121.0509	1	861789.31
163.1327	1	301645.47
246.1853	1	399367.97
276.1592	1	1239246.88
299.1615	1	301112.38
315.1529	1	236358.95

Рис. 7. Хроматограма та мас-спектр MDPV, отримані в результаті дослідження методом РХ-МС/МС

Висновки. MDPV – це синтетична речовина, дослідження якої зазначеними вище інструментальними методами не становить труднощів. Проте отримані результати методом ГХ-МС потребують кваліфікованої оцінки ідентифікації основних іонів в їх мас-спектрах. Особливої уваги потребують методи якісних реакцій і ТШХ, що мають підтверджуватися інструментальними методами дослідження.

Наведені у статті експериментальні дані допоможуть у виборі найбільш придатних методів та умов дослідження, дадуть змогу об'єктивно оцінювати результати досліджень, зокрема стосовно ідентифікації та розрізнення зазначених сполук методом ТШХ.

З огляду на хімічні особливості речовини MDPV для отримання достовірних результатів її кількісного дослідження методом газової хроматографії доцільно проводити описану вище пробопідготовку.

References

1. Moffat A. Clarke's Analysis of Drugs and Poisons in pharmaceuticals, body fluids and post-mortem material / Moffat A., Osselton M., Widdop B. *Fourth Edition*. London-Chicago: Pharmaceutical Press, 2011. 2609 p.
2. Johns S. H. Spot Tests: A Color Chart Reference for Forensic Chemists / S. H. Johns, A. A. Wist, A. R. Najam. *Forensic Sci.* 1979. № 24/3. P. 631–649.
3. Color Tests for the Preliminary Identification of Methcathinone and Analogues of Methcathinone / Toole K., Fu S., Shimmon R., Kraymen N. *Microgram Journal*. 2012. № 9 (1). P. 27–32.
4. Toxicological determination and in vitro metabolism of the designer drug methylenedioxy-pyrovalerone (MDPV) by gas chromatography/mass spectrometry and liquid chromatography/quadrupole time-of-flight mass spectrometry / Strano-Rossi S., Cadwallader A.B., de la Torre X., Botre F. URL: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/20814976> (accessed: 03.11.2018). DOI: 10.1002/rcm.4692.
5. Zamoshets O. P. Doslidzhennia kokainu: metod. posib. / O. P. Zamoshets, M. V. Ostapov. Kyiv: DNDEKTS MVS Ukrainy, 2003. 20 s.
6. Terminology and Information on Drugs. Third edition. UNITED NATIONS. New York, March 2016. 37 p.
7. Gregg R. A. Behavioral pharmacology of designer cathinones: a review of the preclinical literature / R. A. Gregg and S. M. Rawls. *Life Sci.* 2014. № 97 (1). P. 27–30. DOI: 10.1016/j.lfs.2013.10.033.
8. Psychonaut WebMapping Re search Group. *MDPV report*. Institute of Psychiatry; King's College London. London UK, 2009.
9. Synthesis, full chemical characterisation and development of validated methods for the quantification of (±)-4'-methylmethcathinone (mephedrone): a new «legal high» / Santali E.Y., Cadogan A.K., Daeid N.N., Savage K.A., Sutcliffe O.B. *Pharm Biomed Anal.* 2011. № 56 (2). P. 246–255. DOI: 10.1016/j.jpba.2011.05.022.
10. MDPV report, Psychonaut Research Web Mapping Project. URL: <http://yaghmaee.semnan.ac.ir/uploads/MDPV.pdf> (accessed: 03.11.2018).
11. Emergency Department Visits After Use of a Drug Sold as «Bath Salts». – Michigan, November 13, 2010 – March 31, 2011. URL: https://www.cdc.gov/mmwr/preview/mmwrhtml/mm6019a6.htm?s_cid=mm6019a6_w (accessed: 03.11.2018).
12. Kriikku P. New designer drug of abuse: 3, 4-Methylenedioxy-pyrovalerone (MDPV). Findings from apprehended drivers in Finland / Kriikku P., Wilhelm L., Schwarz O., Rintatalo J. URL: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/21477955> (accessed: 03.11.2018). DOI: 10.1016/j.forsciint.2011.03.015.
13. Development of gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) and other rapid screening methods for the analysis of 16 «legal high» cathinone derivatives / Daeid N., Savage K., Ramsay D. *Sci Justice*. 2014. № 54 (1). P. 22–31. DOI: 10.1016/j.scijus.2013.08.004.

Список використаних джерел

1. Moffat A. Clarke's Analysis of Drugs and Poisons in pharmaceuticals, body fluids and postmortem material / Moffat A., Osselton M., Widdop B. Fourth Edition. London-Chicago: Pharmaceutical Press, 2011. 2609 p.
2. Johns S. H. Spot Tests: A Color Chart Reference for Forensic Chemists / S. H. Johns, A. A. Wist, A. R. Najam. *Forensic Sci.* 1979. № 24/3. P. 631–649.
3. Color Tests for the Preliminary Identification of Methcathinone and Analogues of Methcathinone / Toole K., Fu S., Shimmon R., Kraymen N. *Microgram Journal.* 2012. № 9 (1). P. 27–32.
4. Toxicological determination and in vitro metabolism of the designer drug methylenedioxy-pyrovalerone (MDPV) by gas chromatography/mass spectrometry and liquid chromatography/quadrupole time-of-flight mass spectrometry / Strano-Rossi S., Cadwallader A.B., de la Torre X., Botre F. URL: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/20814976> (accessed: 03.11.2018). DOI: 10.1002/rcm.4692.
5. Замошець О. П. Дослідження кокаїну: метод. посіб. / О. П. Замошець, М. В. Остапов. Київ: ДНДЕКЦ МВС України, 2003. 20 с.
6. Terminology and Information on Drugs. Third edition. UNITED NATIONS. New York, March 2016. 37 p.
7. Gregg R. A. Behavioral pharmacology of designer cathinones: a review of the preclinical literature / R. A. Gregg and S. M. Rawls. *Life Sci.* 2014. № 97 (1). P. 27–30. DOI: 10.1016/j.lfs.2013.10.033.
8. Psychonaut WebMapping Research Group. *MDPV report*. Institute of Psychiatry; King's College London. London UK, 2009.
9. Synthesis, full chemical characterisation and development of validated methods for the quantification of (\pm)-4'-methylmethcathinone (mephedrone): a new «legal high» / Santali E. Y., Cadogan A. K., Daeid N. N., Savage K. A., Sutcliffe O. B. *Pharm Biomed Anal.* 2011. № 56 (2). P. 246–255. DOI: 10.1016/j.jpba.2011.05.022.
10. MDPV report, Psychonaut Research Web Mapping Project. URL: <http://yaghmaee.semnan.ac.ir/uploads/MDPV.pdf> (accessed: 03.11.2018).
11. Emergency Department Visits After Use of a Drug Sold as «Bath Salts». – Michigan, November 13, 2010 – March 31, 2011. URL: https://www.cdc.gov/mmwr/preview/mmwrhtml/mm6019a6.htm?s_cid=mm6019a6_w (accessed: 03.11.2018).
12. Kriikku P. New designer drug of abuse: 3, 4-Methylenedioxy-pyrovalerone (MDPV). Findings from apprehended drivers in Finland / Kriikku P., Wilhelm L., Schwarz O., Rintatalo J. URL: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/21477955> (accessed: 03.11.2018). DOI: 10.1016/j.forsciint.2011.03.015.
13. Development of gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) and other rapid screening methods for the analysis of 16 «legal high» cathinone derivatives / Nic Daeid N., Savage K. A., Ramsay D., Holland C., Sutcliffe O. B. *Sci Justice.* 2014. № 54 (1). P. 22–31. DOI: 10.1016/j.scijus.2013.08.004.