

DOI 10.36074/24.04.2020.v3.06

СТВОРЕННЯ БАЗИ ТЕОРЕТИЧНО РОЗРАХОВАНИХ ІНФРАЧЕРВОНИХ (ІЧ) СПЕКТРІВ ПСИХОТРОПНИХ РЕЧОВИН КАТИНОНОВОГО РЯДУ

Пасічник В'ячеслав Вікторович

заступник завідувача відділу – завідувач сектору фізико-хімічних досліджень
відділу досліджень матеріалів, речовин і виробів
Черкаський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС

Шкурдода Сергій Вікторович

завідувач відділу досліджень матеріалів, речовин і виробів
Черкаський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС

Пасічник Ірина В'ячеславівна

здобувач вищої освіти навчально-наукового інституту аграрних та
природничих наук
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

УКРАЇНА

Експертне дослідження психоактивних речовин катінонового ряду є частиною криміналістичної експертизи наркотичних засобів і психотропних речовин та виконується з метою отримання доказів при досудовому розслідуванні справ про незаконне поводження з наркотичними засобами, психотропними речовинами та прекурсорами [1]. На даний час, за умови розповсюдження психотропних речовин актуальним залишається питання дослідження речовин, зокрема катінонового ряду з метою їх якісного визначення методом ІЧ-Фур'є спектроскопії. Вказаний метод є неруйнуючим, високоточним, досить швидким та інформативним, що дозволяє ідентифікувати речовини вказаної категорії [2-7].

Метою даної роботи є початок створення бази теоретично розрахованих ІЧ спектрів психотропних речовин катінонового ряду. Створення і упорядкування цієї бази дає можливість проводити експертизи психотропних речовин неруйнуючим високоточним методом, порівнюючи практично зняті ІЧ спектри з теоретично розрахованими методом квантових розрахунків (з врахуванням поправочних коефіцієнтів).

Об'єктами дослідження були досить новітні психотропні речовини катінонового ряду, а саме: **4-ММС** (4-метилметкатинон); **Дибутілон** (bk-MMBDB, bk-DMBDB); **4-СЕС** (1-(4-хлорфеніл)-2-(етиламіно)-пропан-1-он); **4-CI-PVP** (4-хлоро- α -піролідіновалерофенон); **α -PPP** (α -Pyrrolidinopropiophenone, α -піролідінопропіофенон).

Загальна характеристика речовин:

4-ММС (4-метилметкатинон; (RS)-2-(метиламіно)-1-(4-метилфеніл)пропан-1-он) [8,9]. Англomовні жаргонні назви: meow meow (мяу-мяу) (через скорочення «4-MMCathinone» → «meow meow cat» → «meow meow»), meow / miaow / mieow (мяу.) meph (меф), Cristalius (крісталіус), cat piss

(котяча сеча), mephstasy (мефстезі), mad cow (божевільна корова), bubble / bubbles (міхур, бульбашки), M-Cat, TopCat. У США і Європі мефедрон незаконно якийсь час продавали під виглядом солі для ванн.

Дибутилон (bk-MMBDB, bk-DMBDB; 1-(1,3-бензодіоксол-5-іл)-2-(диметиламіно)бутан-1-он) [10,11] - є стимулюючим препаратом класу психотропних речовин амфетамінового ряду - фенетиламіну та катитинону. Це структурно пов'язане з бутилоном - дизайнерським препаратом, який був виявлений у продуктах, що незаконно продаються у вигляді солей для ванн або рослинної їжі. У 2018 році дибутилон був третім найпоширенішим препаратом класу катитинону, який було визначено в заходах з контролю за вживанням наркотиків.

4-СЕС (1-(4-хлорфеніл)-2-(етиламіно)-пропан-1-он - також відомий як 4- СМС та Клефедрон) [12] - стимулюючий препарат класу катинонів, який нелегально продається в мережі Інтернет як дизайнерський психотропний препарат.

4-Cl-PVP (4-хлоро- α -піролідіновалерофенон; 4-хлоро- α -піролідінопентіофенон; 1-(4-хлорфеніл)-2-(1-піролідиніл)-1-пентанон) [13]. Також відомий як 4-хлор-альфа-піролідінопентіофенон, 4-хлоро- α -PVP, 4Cl-PVP або 4C-PVP) є рекреаційним дизайнерським препаратом класу піролідінофенонів, подібним за будовою альфа-піролідінопентіофенону (α -ПВП). У Сполучених Штатах 4-хлор- α -PVP є контрольованою речовиною за Графіком I. Нелегально продається в мережі Інтернет як дизайнерський психотропний препарат.

α -PPP (α - Pyrrolidinopropiophenone; 1-феніл-2-(1-піролідиніл)-1-пропанон) [14] - є стимулюючим препаратом. Він за будовою схожий на пригнічувач апетиту діетилпропіон і має аналогічну дію на тварин. Про цю сполуку відомо мало, але вона була виявлена лабораторіями Німеччини як інгредієнт таблеток «екстазі», вилучених правоохоронними органами. Було встановлено, що цей препарат справляє стимулюючу дію на тварин на людину. α -PPP є незаконним у Великій Британії внаслідок заборони замінників заміщених катинонів, і через його структурну схожість з незаконними наркотиками, такими як меткатинон та піровалерон, він може вважатися аналогом контрольованої речовини в деяких країнах, таких як США, Австралія та Нова Зеландія. Аналоги α -PPP, такі як піровалерон та MDPV, широко використовуються і, як вважається, є більш сильними та звикаючими, ніж сам α -PPP. Структурно-активні зв'язки цих речовин лікарських засобів свідчать про те, що різноманітні кільцезаміщені аналоги є потенційними препаратами зловживання, а стимулююча активність виявлена для аналогів між 3 і 6 атомами вуглецю в алкільних ланцюгах. Крім того α -PPP має нейротоксичні ефекти для тварин.

Практична частина.

Для проведення досліджень нами було використано ІЧ-спектрофотометр Fisher Scientific Nicolet 380 FT-IR, який оснащений приставкою ППВВ (порушеного повного внутрішнього відбиття) Smart Performer з кристалом Zn/Se. ІЧ діапазон, який дозволяє зняти вказаний кристал знаходиться в межах 4000-650 cm^{-1} .

Хід досліджень.

Невелику кількість кожної з вище зазначених речовин послідовно поміщували на кристал приставки ППВВ та проводили реєстрацію спектру за наступних умов:

Прилад	Thermo Fisher Scientific Nicolet 380 FT-IR
приставка ППВВ	Smart Performer (кристал – Zn/Se)
діапазон реєстрації спектра	4000-650 cm^{-1}
кількість сканів	32
детектор	DTGS KBr
Світлоділильник	KBr
програмне забезпечення	Omnicon EZ OMNIC 7.4.127

Для проведення аналізу зарядів, довжин зв'язків та розміру кутів в досліджуваних молекулах ми користувалися методом PM3 (**Parameter Model 3** - напівемпіричний квантово-хімічний метод розрахунку, в основі якого лежить метод молекулярних орбіталей і який є вдосконаленням методів MNDO та AM1) і програмою HyperChem. При дослідженні геометрії молекул ми користувалися цифровою системою позначень атомів, заданою вказаною програмою.

Також програмою HyperChem за методом PM3 розраховано заряди на атомах і довжини зв'язків у молекулах та розраховано теоретичні ІЧ спектри вказаних речовин.

Нами встановлено, що програма HyperChem дає невелику похибку в розрахунках ІЧ спектрів (зміщення хвильових чисел), що приводить до необхідності врахування поправочних коефіцієнтів. Вирахувавши поправочні коефіцієнти до спектрів молекул шляхом віднесення теоретичної величини до практичної і врахувавши їх, можна сказати, що практично зняті спектри є ідентичними до теоретично розрахованих. Поправочний коефіцієнт розраховувався за добре відомою з літературних джерел [4-7] найінтенсивнішою смугою ІЧ спектру карбоксильної групи C=O . Для всіх молекул поправочний коефіцієнт приймав приблизно однакове значення в межах 0.84-0.85.

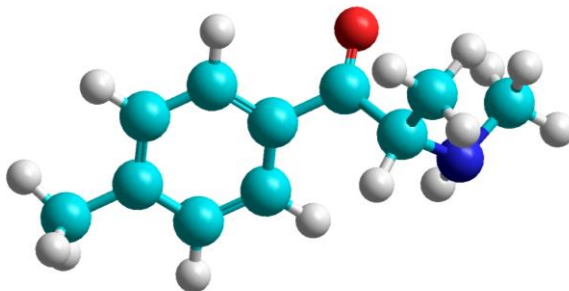


Рис. 1. Оптимізована програмою HyperChem за методом PM3 структура молекули 4-ММС (4-метилметкатинону, мефедрону).

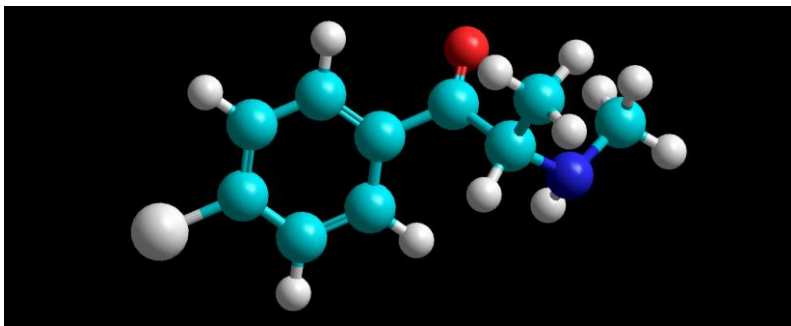


Рис. 2. Оптимізована програмою HyperChem за методом РМ3 структура молекули 4-СЕС (4-хлорметкатинону).

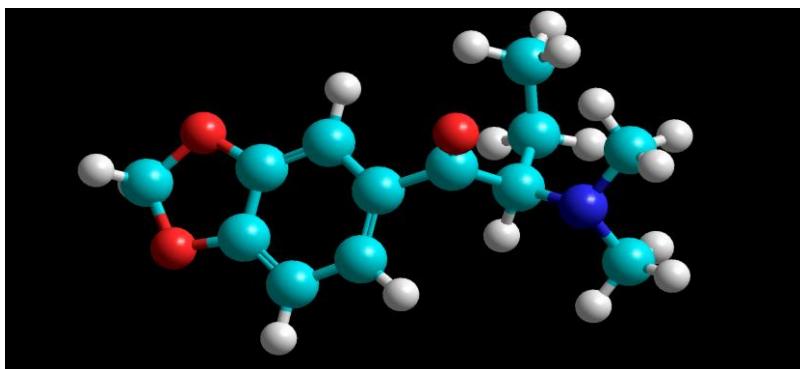


Рис. 3. Оптимізована програмою HyperChem за методом РМ3 структура молекули дибутилоу (bk-MBDB)

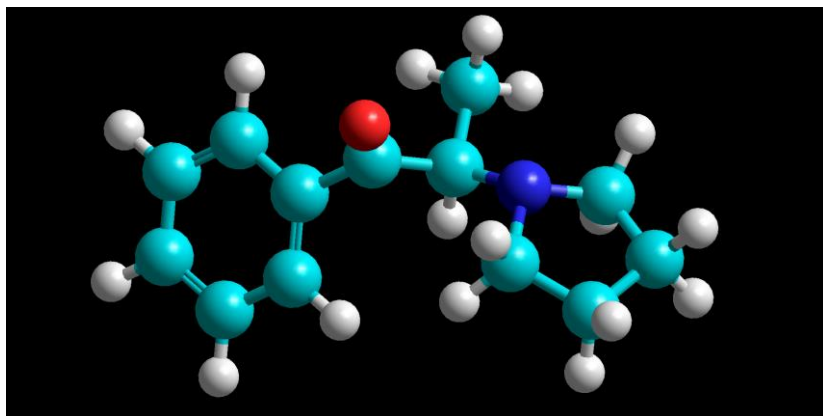


Рис. 4. Оптимізована програмою HyperChem за методом РМ3 структура молекули PPP.

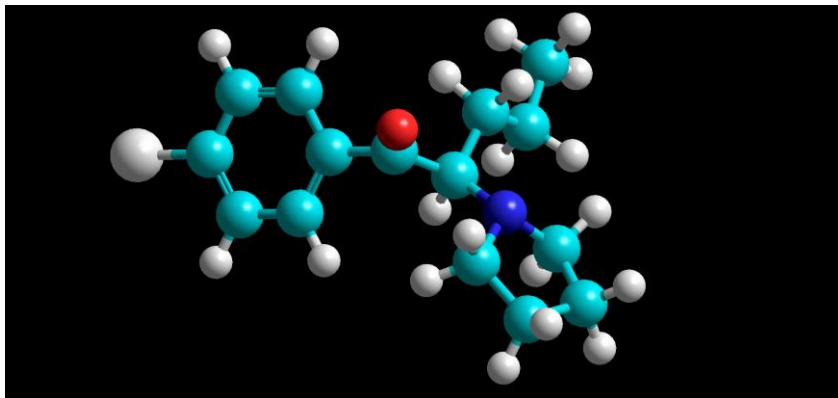


Рис. 5. Оптимізована програмою HyperChem за методом РМ3 структура молекули CI-PVP.

ВИСНОВКИ.

1. За допомогою методу РМ-3 з використанням програмного забезпечення HyperChem нами теоретично розраховано ІЧ-спектри молекул речовин катинінового ряду, які є особливо небезпечними психотропними речовинами, зокрема:

- 4-MMC (4-метилметкатинону);
- Дибутилону (bk-MMBDB, bk-DMBDB);
- 4-CEC (1-(4-хлорфеніл)-2-(етиламіно)-пропан-1-ону;
- 4-CI-PVP (4-хлоро- α -піролідиновалерофенону;
- α -PPP (1-феніл-2-(1-піролідиніл)-1-пропанону).

2. Практично отримано ІЧ спектри речовин 4-MMC; Дибутилону; 4- CEC; 4- CI-PVP та α -PPP шляхом зняття спектру стандартів вищезазначених речовин на приладі Thermo Fisher Scientific Nicolet 380 FT-IR за допомогою приставки ППБВ Smart Performer (кристал – Zn/Se) в діапазоні хвильових чисел 4000 - 650 cm^{-1} .

3. Встановлено, що молекулярні спектри відповідних стандартів речовин містять смуги поглинання, які за кількістю, положенням та відносною інтенсивністю смуг співвідносяться до теоретично розрахованих спектрів речовин 4-MMC; Дибутилону; 4-CEC; 4-CI-PVP та α -PPP.

4. Розроблена типова схема проведення експертного дослідження особливо небезпечних психотропних речовин катинінового ряду методом ІЧ-Фур'є спектроскопії. Теоретично та практично доведено можливість розрахунку ІЧ-спектрів речовин, віднесених до вказаної категорії.

Список використаних джерел:

- [1] Рекомендуемые методы идентификации и анализа синтетических катинонов в изъятых материалах. Руководство для национальных лабораторий экспертизы наркотиков. ST/NAR/49. (2016). Нью-Йорк: ООН.
- [2] Пентин, Ю.А. & Курамшина, Г.М. (2008). *Основы молекулярной спектроскопии*. Москва: Мир.
- [3] Ластухін, Ю.О. & Воронов, С.А. (2001). *Органічна хімія*. Львів: Центр Європи.

- [4] Наканиси, К. (1965). *Инфракрасные спектры и строение органических соединений*. Москва: Мир.
- [5] Кендалл, Д. (ред.) (1970). *Прикладная инфракрасная спектроскопия*. Москва: Мир.
- [6] Казизина, Л. А. & Куплетская, Н. Б. (1971). *Применение ИК- и УФ-спектроскопии в органической химии*. Москва. Высшая школа.
- [7] Иоффе, Б. В., Костиков, Р. Р. & Разин, В. В. (1984). *Физические методы определения строения органических соединений*. Москва: Высшая школа.
- [8] Мепедрон. (2020). Вилучено з <https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9C%D0%B5%D1%84%D0%B5%D0%B4%D1%80%D0%BE%D0%BD>.
- [9] Mephedrone. (2020). Вилучено з <https://en.wikipedia.org/wiki/Mephedrone>.
- [10] Dibutylon. (2020). Вилучено з <https://www.wikiwand.com/sh/Dibutylon>.
- [11] Dibutylon. (2020). Вилучено з <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Dibutylone>.
- [12] 4-Chloromethcathinone. Вилучено з <https://en.wikipedia.org/wiki/4-Chloromethcathinone>.
- [13] 4-Chloro-alpha-pyrrolidinovalerophenone. Вилучено з <https://en.wikipedia.org/wiki/4-Chloro-alpha-pyrrolidinovalerophenone>
- [14] Alpha-Pyrrolidinopropiophenone. Вилучено з <https://en.wikipedia.org/wiki/Alpha-Pyrrolidinopropiophenone>.