



Co-funded by the Prevention of and Fight
against Crime Programme of the European Union

IDENTIFIKACIJE NPS

primeri iz prakse in sodelovanje različnih deležnikov



Mojca Janežič

E-Mail: mojca.janezic@policija.si

MNZ GPU, National Forensic Laboratory, Vodovodna 95, 1000 Ljubljana, Slovenia

Pridobivanje vzorcev NPS

- ▶ Zasegi Policije
- ▶ NPS nakupujemo preko posrednikov iz različnih spletnih strani
- ▶ Sodelovanje z nevladnimi organizacijami, kot so DrogArt, Stigma itd.
- ▶ Sodelovanje z drugimi inštitucijami v Sloveniji (Carina, MZZ itd.)
- ▶ Sodelovanje z drugimi inštitucijami v EU (npr. Forensic Science Institute Zurich, Hungarian Institute for Forensic Science, Swedish National Forensic Centre, Institute of Forensic Medicine Freiburg itd.)

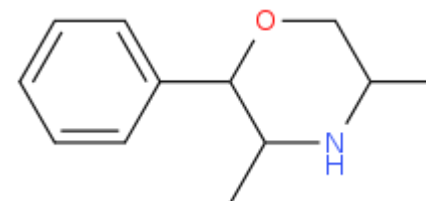
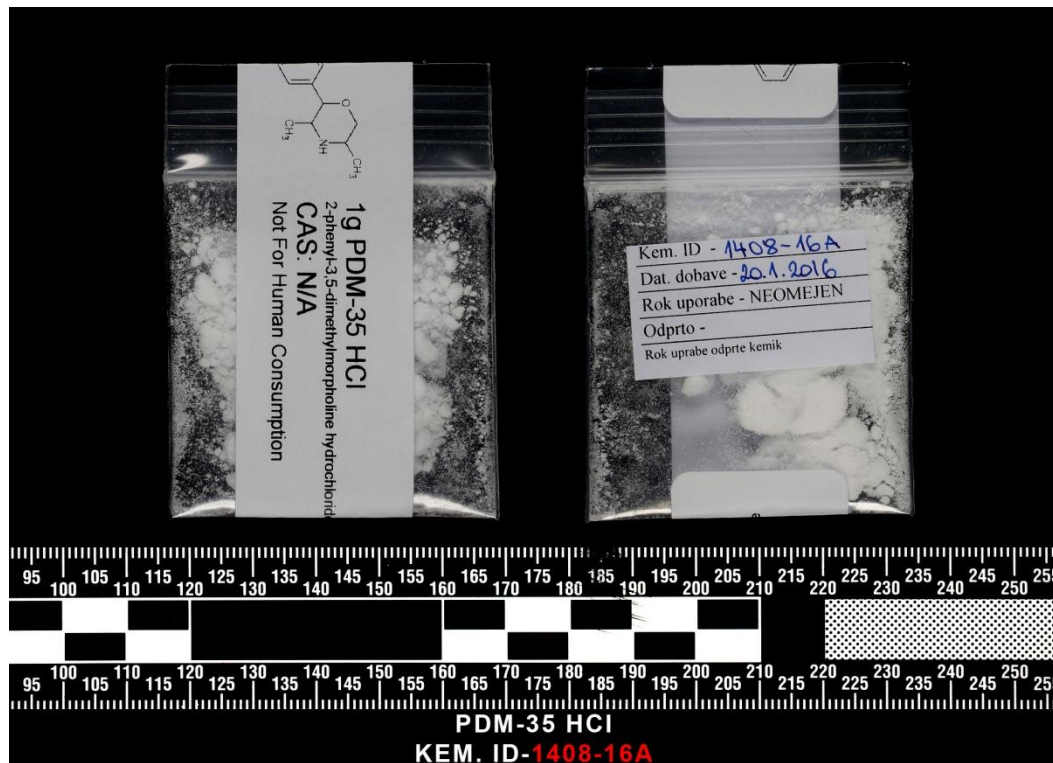
Izzivi pri identifikaciji:

- ▶ Substance so večinoma nove, zato njihovi spektralni podatki še niso na voljo, niti ne referenčni materiali
- ▶ Uporaba več različnih analitskih metod (laboratorij mora imeti ustrezno opremo in znanje) za uspešno identifikacijo
- ▶ Interpretacijo rezultatov opravlja strokovno usposobljeno osebje
- ▶ Sodelovanje zunanjih partnerjev (npr. FKKT pri identifikaciji substanc z NMR, drugih inštitucij v EU z izmenjavo analitskih podatkov)
- ▶ Dostop do literature

Identifikacija NPS – analitske metode

- ▶ Vzorci najprej fotografiramo.
- ▶ Metode analize:
 - Preliminarno testiranje
 - Plinska kromatografija z masno-selektivno spektrometrijo (GC-MS) – vzorce po potrebi tudi derivatiziramo
 - Fourier Transform infrardeča spektrofotometrija (FTIR)
 - Kombinacija GC-MS s FTIR v kondenzirani fazi
 - Tekočinska kromatografija z masnim analizatorjem na čas preleta ionov (HPLC-TOF)
 - Ionska kromatografija (IC)
 - Nuklearna magnetna resonanca (NMR, v sodelovanju s FKKT)

Primer: PDM-35



Molekulska formula:

$C_{12}H_{17}NO$

Molekulska masa:

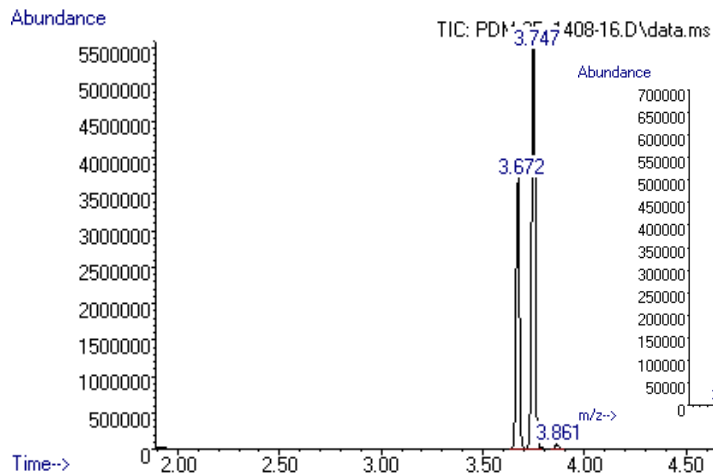
191.27 g/mol

Bela praškasta snov, pridobljena kot PDM-35, tudi 5-metilfenmetrazin (2-fenil-3,5-dimetilmorfolin)

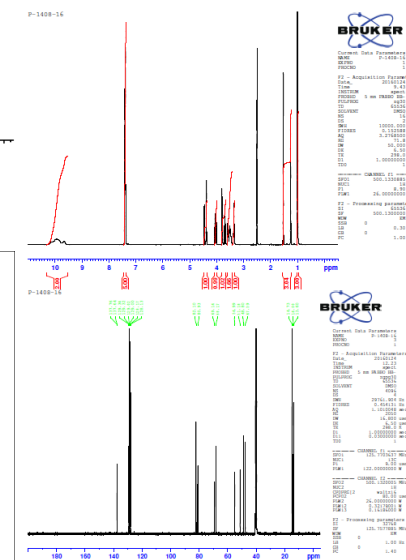
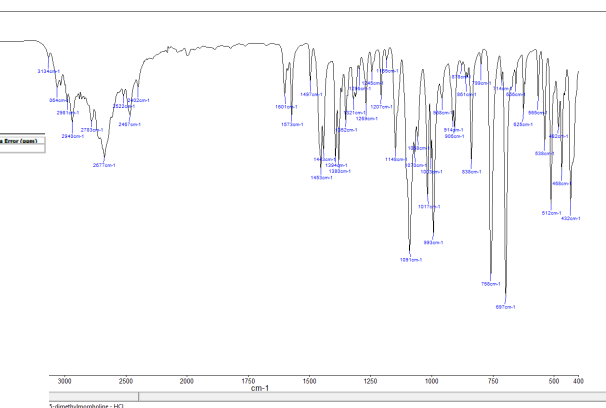
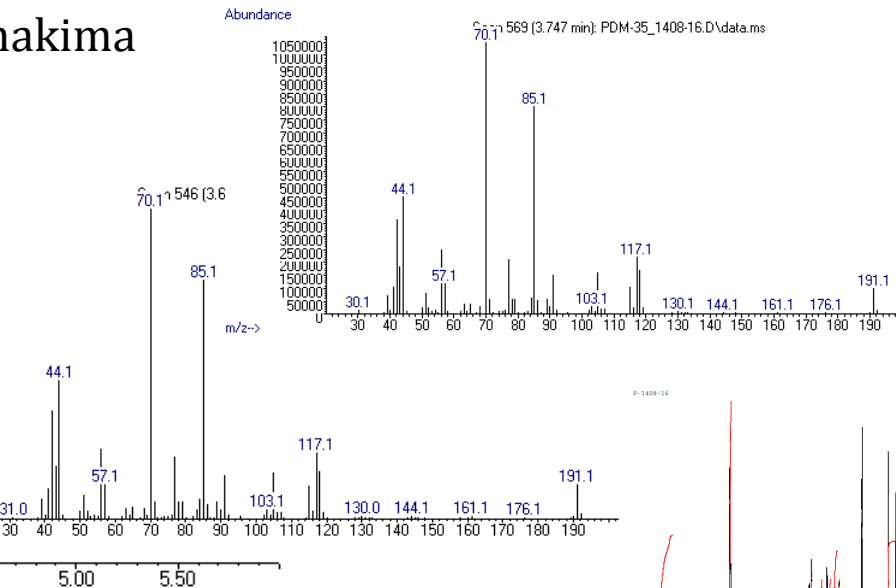
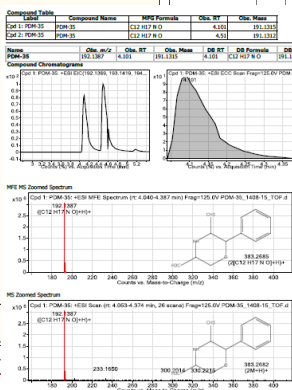
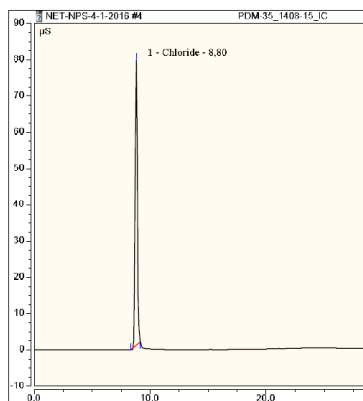
Primer:

PDM-35 - Inštrumentalne metode analiz

- V GC-MS dva signala, oba z enakima masnima spektroma



No.	Time min	Peak Name	Peak Type	Area µS	Height µS	Amount mg/L
1.00	8.80	Chloride	BMB	17.21	78.70	D.S.
TOTAL:				17.21	78.70	0.00

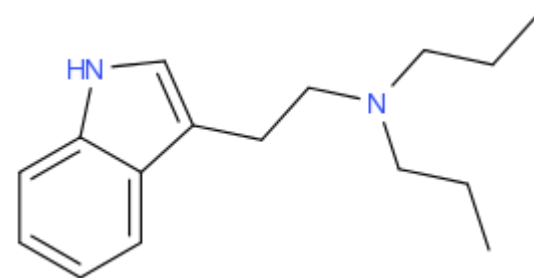
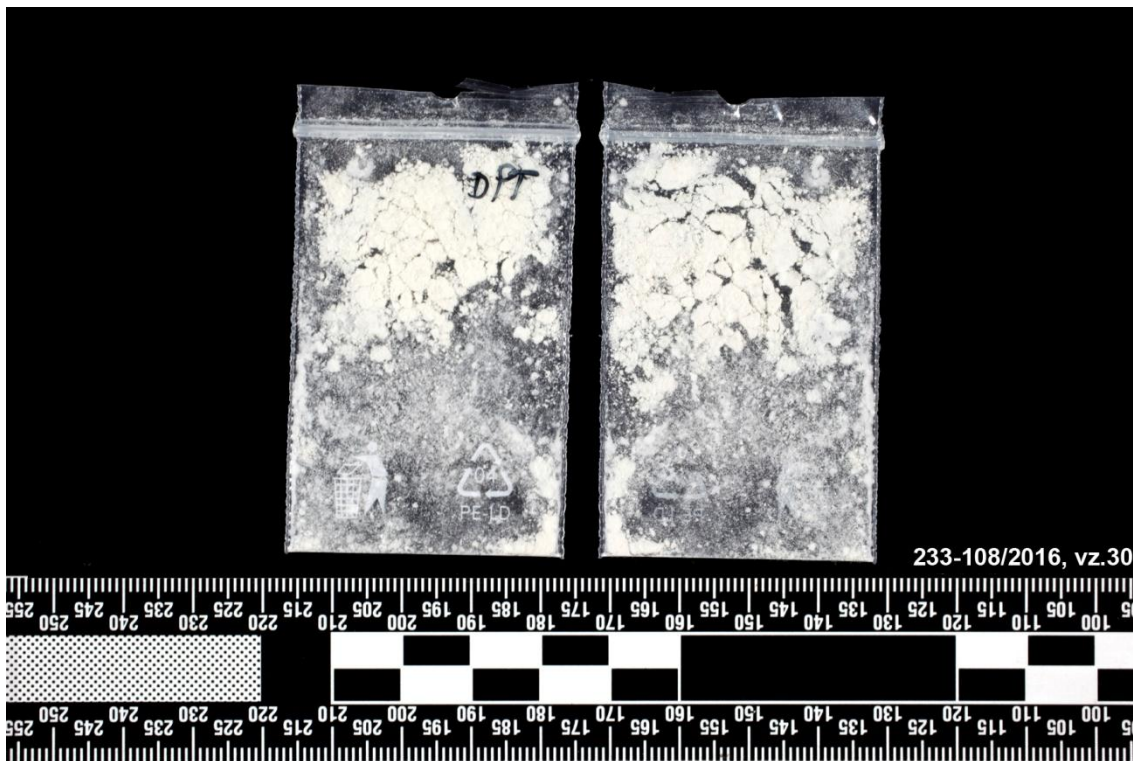


Primer: PDM-35 - rezultati

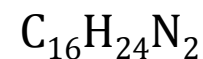
- ▶ Kupljen vzorec je ustrezal predvideni strukturi 2-fenil-3,5-dimetilmorfolina oz. PDM-35
- ▶ PDM-35 v obliki hidroklorida
- ▶ Vzorec je najverjetneje zmes dveh diastereoizomer, ne moremo pa ugotoviti, katerih
- ▶ Podoben primer 4-fluoro-MPH (4-Fluorometilfenidat)

Primer:

Vzorec iz DrogArta, sum na DPT



Molekulska formula:

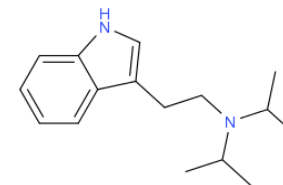


Molekulska masa:

244.38 g/mol

Bela praškasta snov, pridobljena kot DPT ([2-(1H-indol-3-il)etil]dipropilamin),
predana DrogArtu (št. vzorca 30)

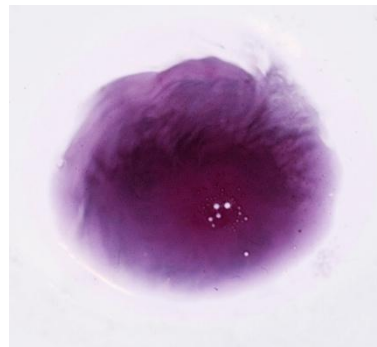
Po strukturi je DPT podoben DiPT



Primer:

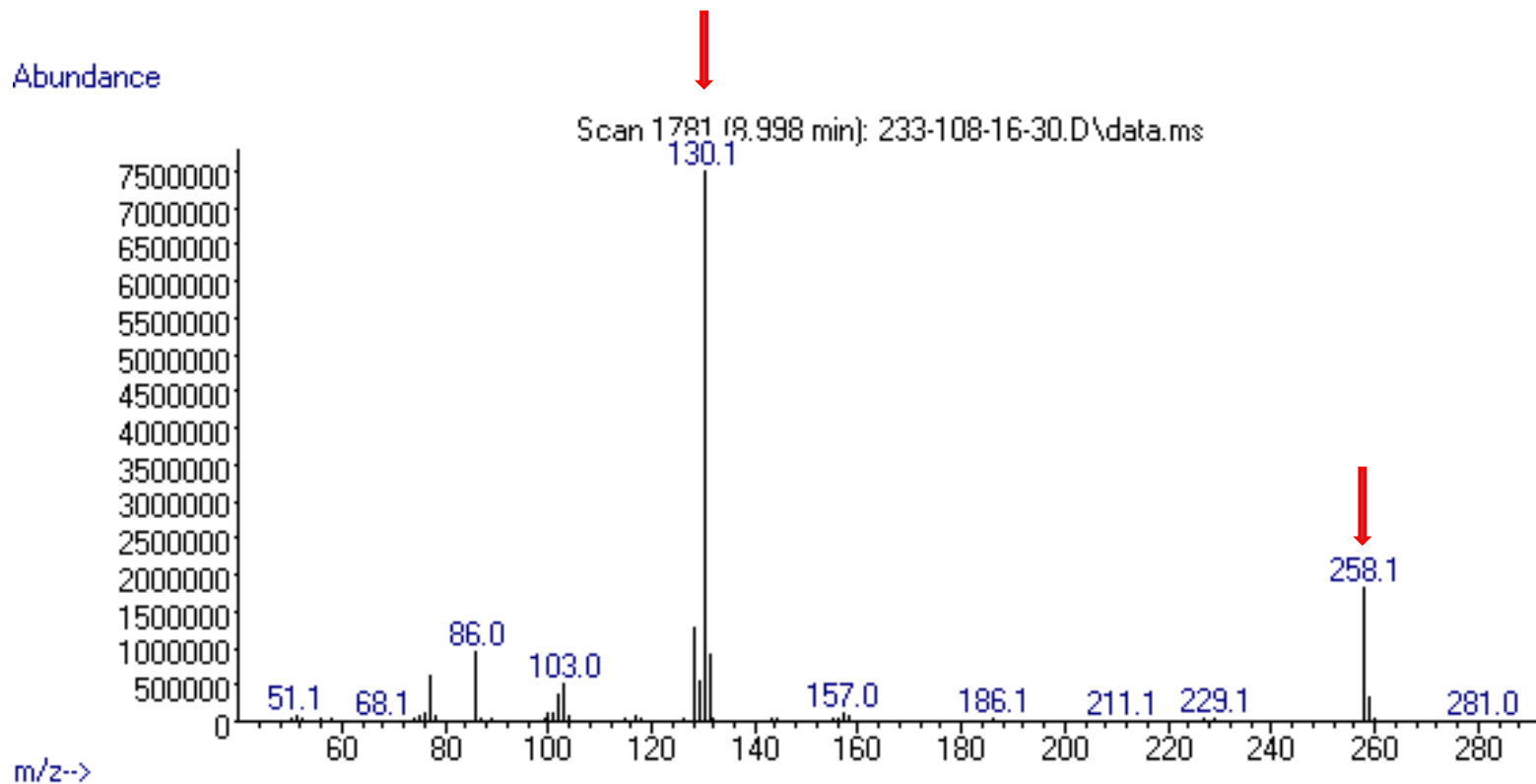
Vzorec iz DrogArta - Preliminarni testi

- ▶ Marquisov reagent: neg
- ▶ Bertrandov reagent (na alkaloida): poz (bela oborina)
- ▶ Ehrlichov reagent na triptamine: poz



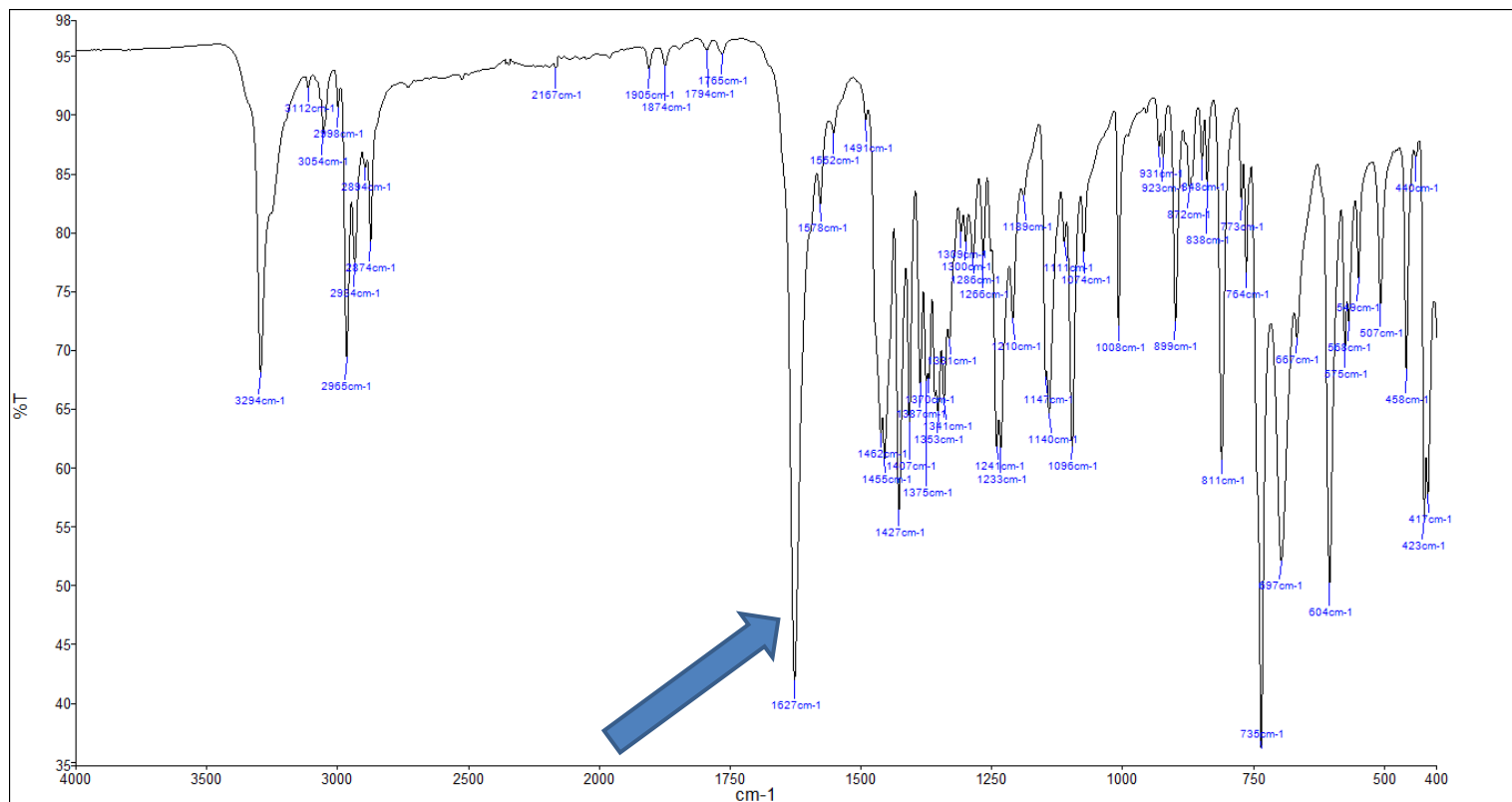
Vzorec iz DrogArta - Inštrumentalne metode: GC-MS

- ▶ Masni spekter ni ustrezal DPT
- ▶ Molekulski ion 258, bazni ion 130 (namesto 114)



Primer:

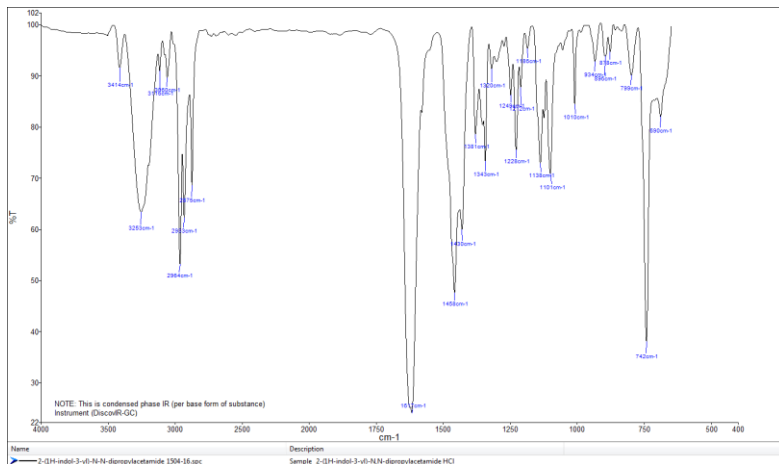
Vzorec iz DrogArta - Inštrumentalne metode: FTIR



- ▶ Vrh pri 1627 cm⁻¹ v IR spektru nakazuje na -CO- skupino (v DPT ni -CO- skupine!)

Inštrumentalne metode: GC-FTIR

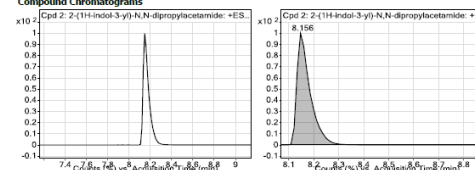
Condensed phase, IC, LC-TOF



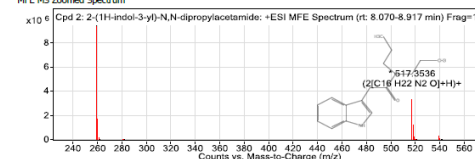
Compound Table

Label	Compound Name	MFG Formula	Obs. RT	Obs. Mass			
Cpd 2: 2-(1H-indol-3-yl)-N,N-dipropylacetamide	2-(1H-indol-3-yl)-N,N-dipropylacetamide	C16 H22 N2 O	8.156	258.1736			
Name	Obs. m/z	Obs. RT	Obs. Mass	DB RT	DB Formula	DB Mass	DB Mass Error (ppm)
2-(1H-indol-3-yl)-N,N-dipropylacetamide	259.1808	8.156	258.1736	8.16	C16 H22 N2 O	258.1732	-1.32

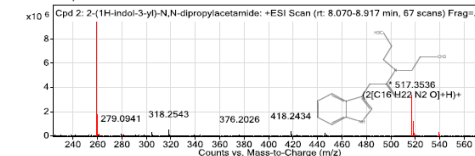
Compound Chromatograms



MFE MS Zoomed Spectrum



MS Zoomed Spectrum

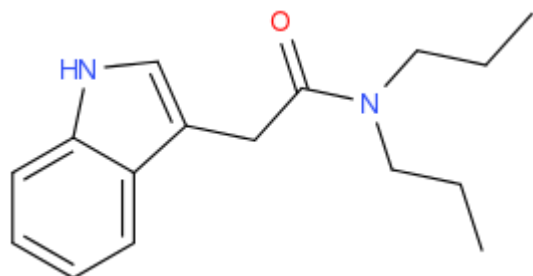


- ▶ Vrh pri 1627 cm^{-1} v IR spektru nakazuje na -CO- skupino (v DPT ni -CO- skupine!)

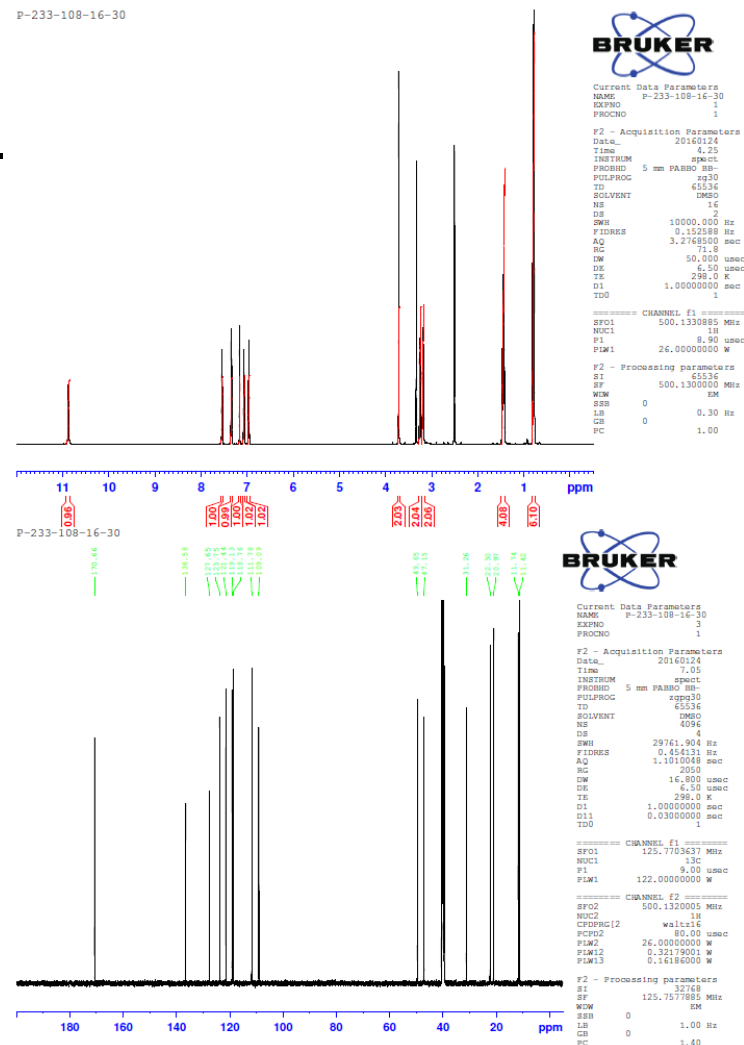
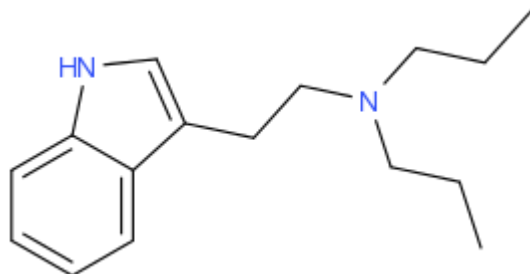
Primer:

Vzorec iz DrogArta - Inštrumentalne metode: NMR

- ▶ Analizo opravili na FKKT
- ▶ Rezultat: spojina 2-(1H-indol-3-il)-N,N-dipropilacetamid

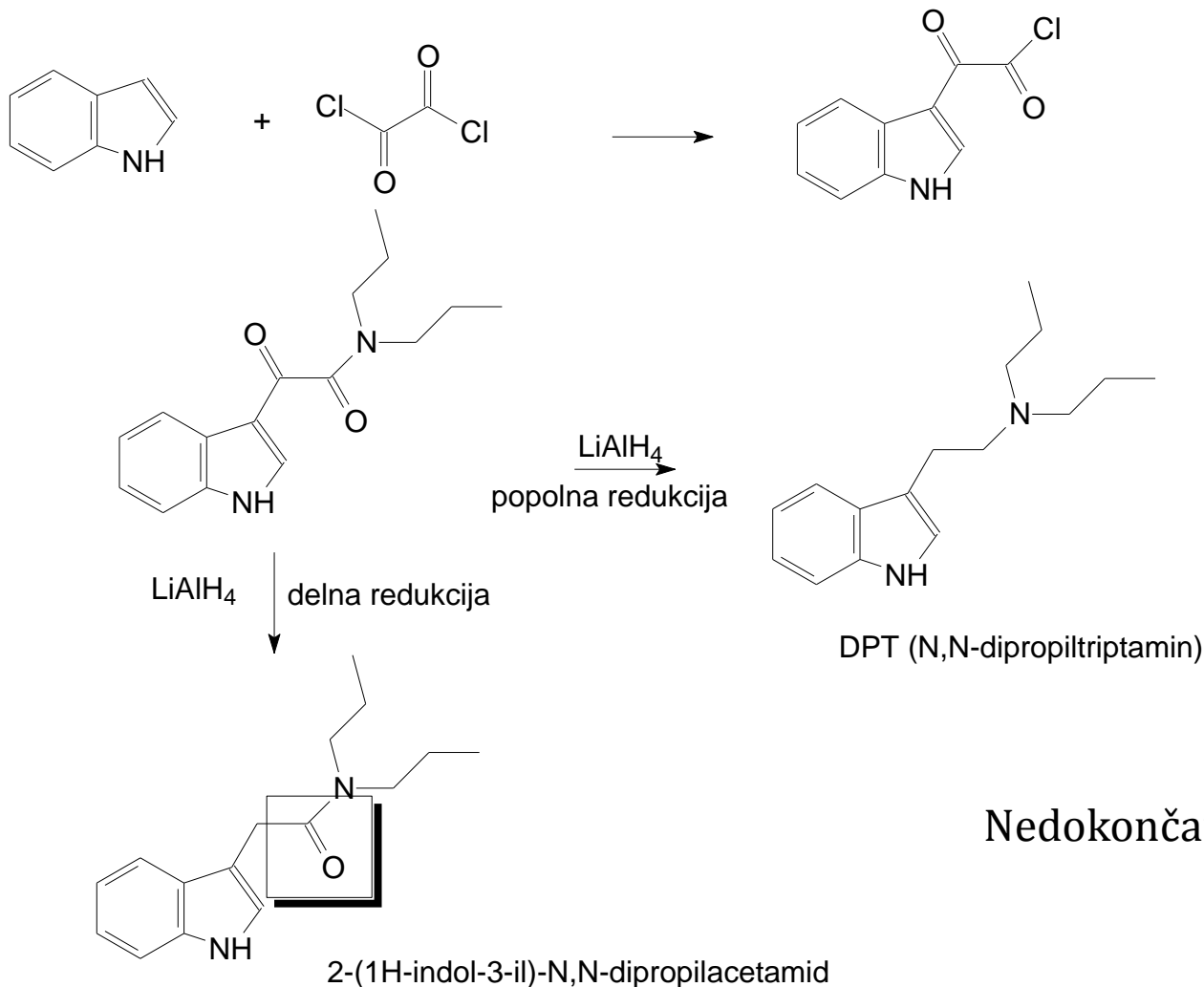


in ne DPT



Primer:

Vzorec iz DrogArta - Razlaga (po TIHKAL-u)



- ▶ Rezultate kemijskih analiz združimo
- ▶ Sestavimo analitski report za vzorec
- ▶ Objava na Internetni spletni strani
http://www.policija.si/apps/nfl_response_web/seznam.php
- ▶ Omogoča iskanje, razvrščanje



Co-funded by the Prevention of and Fight against Crime Programme of the European Union



Vodovodna 95
1000 Ljubljana
SLOVENIJA

T: +386 (0)1 428 44 93
E: nfl@policija.si
www.policija.si

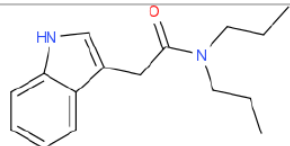
ANALYTICAL REPORT¹

2-(1H-indol-3-yl)-N,N-dipropylacetamide (C₁₆H₂₂N₂O)

2-(1H-indol-3-yl)-N,N-dipropylacetamide

Remark – other NPS detected: none

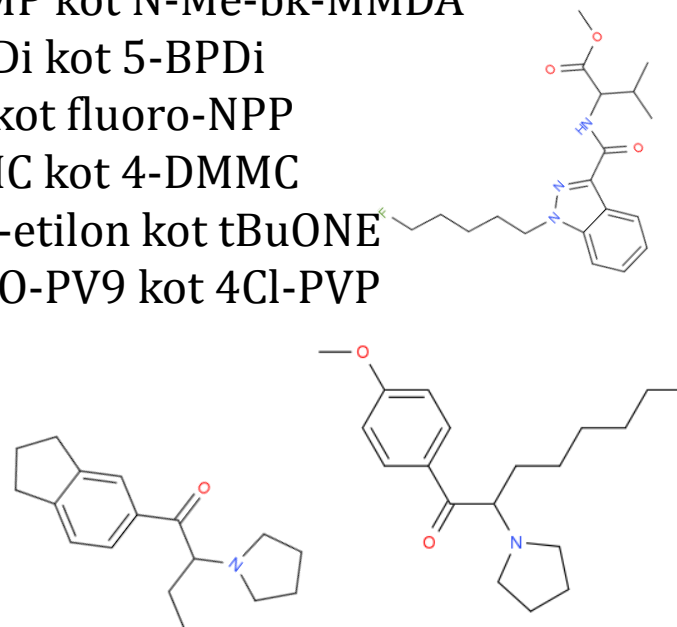
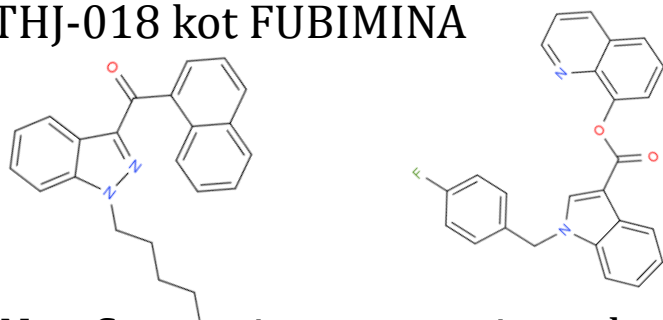
Sample ID:	1504-16 z(lab. note 233-108/2016; spl.:30)
Sample description:	powder - white
Sample type:	collected /NGO-collected
Date of sample receipt (M/D/Y):	1/6/2016
Date of entry (M/D/Y) into NFL database:	2/10/2016
Report updates (if any) will be published here:	http://www.policija.si/apps/nfl_response_web/seznam.php

Substance identified - structure ² (base form)	
Systematic name	2-(1H-indol-3-yl)-N,N-dipropylacetamide
Other names	
Formula (per base form)	C ₁₆ H ₂₂ N ₂ O
M _w (g/mol)	258,37
Salt form/anions detected	HCl
StdInChIKey	AEPJTCZBIULDTE-UHFFFAOYSA-N
Compound Class	Indolalkylamines (fe tryptamines)
Other NPS detected	none
Add.info (purity..)	pure by GC, HPLC-TOF, NMR

Nekateri primeri kupljenih NPS, ki niso ustrezali naročenim

5F-ADB kot 5F-PCN
5F-APP-PINACA kot 5F-APP-PICA
AZ-037 kot AB-CHFUPYCA
EG-2201 kot EG-018
FDU-PB22 kot FUB-PB22
FUB144 kot 5F-AMB
MA-CHMINACA kot AMB-CHMICA
MMB-CHMINACA kot MDMB-CHMICA
MMB-CHIMINACA kot MMB-CHMICA
THJ-018 kot FUBIMINA

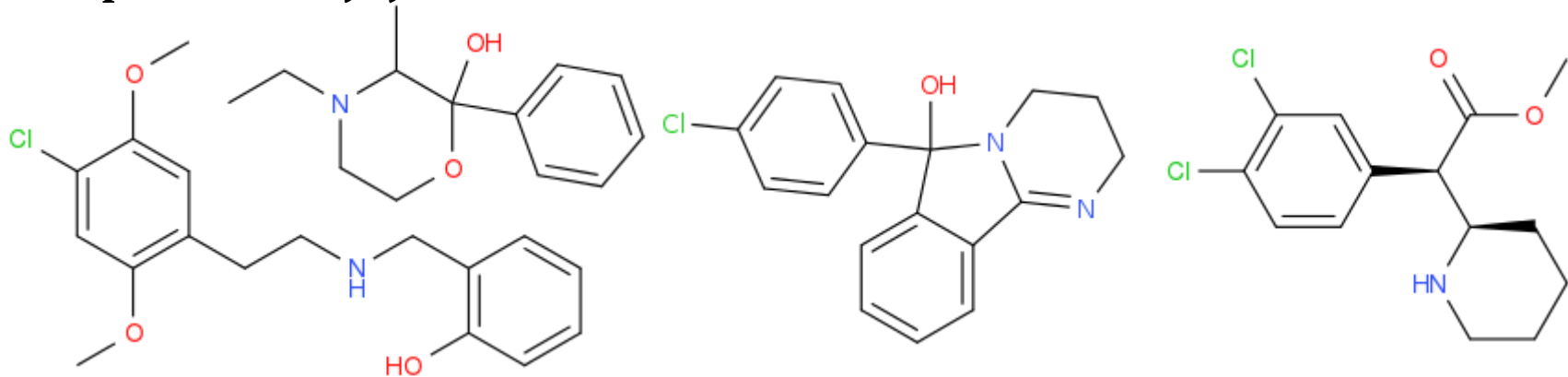
5F-AMP-indol kot 5F-PY-PICA
5F-AEB kot ADB-CHMINACA
Bk-IVP kot NEB-inden analog
2-AiMP kot N-Me-bk-MMDA
5-PPDi kot 5-BPDi
NPP kot fluoro-NPP
2-NMC kot 4-DMMC
5-Me-etilon kot tBuONE
4-MeO-PV9 kot 4Cl-PVP



Npr. Syntacaine: trenutni rezultati nakazujejo, da vzorec vsebuje lokalni anestetik benzokain in MPA (vzorec je še v analizi).

Ugotovitve

- ▶ Velik delež vzorcev ne ustreza substanci, navedeni na spletni strani
- ▶ Pogosto vsebujejo manjše deleže primesi (npr. stranske ali vmesne produkte sintez, topila, kisline – npr. fumarna k.)
- ▶ Nekateri NPS-ji predstavljajo velik analitski izziv (npr. HDEP-28, 3,4-CTMP, 25-NBOH serija, N-etilfentrazol, homomezindol) – pri analizi razpadajo oz. se preoblikujejo



Zaključek

- ▶ Spletno stran NPS AND RELATED COMPOUNDS - ANALYTICAL REPORTS (http://www.policija.si/apps/nfl_response_web/seznam.php) sproti dopolnjujemo z monografijami

▶ Hvala za pozornost