

## Ізотопологічний склад речовини як одна з її індивідуалізуючих ознак

**Юрій Філіпчук**

головний судовий експерт, УкрНДІ спецтехніки та судових експертиз  
Служби безпеки України, м. Київ, Україна,  
ORCID: <http://orcid.org/0009-0007-2239-218X>, e-mail: [filyuv@gmail.com](mailto:filyuv@gmail.com)

*Розглянуто значення проведення аналізу речовини зі встановленням ізотопологічного профілю речовини, що може стати наступним значущим кроком у пошуку індивідуалізуючих ознак речовин, закладених безпосередньо у структурі їхніх молекул.*

**Ключові слова:** ізотопологи; ізотопний малюнок; ізотопологічний профіль речовини.

## Isotopological Composition of Substances as an Individualizing Feature

**Yurii Filipchuk**

*The paper explores the significance of substance analysis with the establishment of its isotopological profile, which could represent a key step in identifying individualizing characteristics embedded directly within the molecular substances' structure.*

**Keywords:** isotopologues; isotopic pattern; isotopological substance's profile.

Типовими завданнями криміналістичних досліджень матеріалів, речовин і виробів, визначеними з позицій оперативно-розшукової або слідчої діяльності, є: виявлення — установлення факту наявності або відсутності цільових об'єктів (речовин, матеріалів), діагностика — визначення природи, найменування, призначення, галузі застосування або інших класифікаційних властивостей цільових об'єктів та ідентифікація — установлення тотожності, спільної родової або групової належності шуканого об'єкта, і об'єкта, який піддають перевірці. Для вирішення основного завдання ідентифікації — установлення індивідуально-конкретної тотожності (єдиного цілого) — експерт має виявити ознаки, які індивідуалізують конкретний виріб і виявляються в порівнюваних об'єктах як поодинокі. У криміналістиці для здобуття інформації, поряд з морфологічними характеристиками фізичних тіл, найбільше значення мають властивості самих речовин і матеріалів, які складають виріб — зокрема, склад їхніх молекул.

У випадку з хімічними речовинами ознаки, що індивідуалізують речовину, виникають, зокрема, на стадії їх біосинтезу / синтезу. Для більшості елементів існує кілька природних ізотопів, тому зазвичай не спостерігається ізотопно чистих молекул, які дають моноізотопний пік у мас-спектрі, натомість спостерігаються всі їх можливі варіанти з певною ймовірністю, яка, за відсутності чинників, що впливають на ізотопне співвідношення, обумовлена відносною ізотопною поширеністю. У випадку з речовинами рослинного походження співвідношення між стабільними ізотопами хімічного елементу, з яких побудовані їхні молекули, визначається видом рослини, джерелом яких вона є (шляхом, за яким у них відбувається фотосинтез — С3-фотосинтез, С4-фотосинтез або САМ-фотосинтез), а також умовами, у яких росла рослина — географічне положення, геологічні, кліматичні фактори. У випадку з речовинами синтетичного походження співвідношення між стабільними ізотопами обумовлено особливостями виробництва цих речовин,

що пов'язані із джерелами сировини (ізо-топним складом молекул прекурсорів — у хімічному сенсі цього терміна — речовин, фрагменти молекул яких увійшли до складу молекули кінцевої речовини). Співвідношення між стабільними ізотопами в молекулах сполук, із метою певного подальшого використання цих сполук, можуть бути, зокрема, штучно закладеними. Відповідно, у випадку з речовинами напівсинтетичного походження співвідношення між стабільними ізотопами у їхніх молекулах обумовлено як видом рослини й умовами її зростання, джерелом компонентів рослинного походження яких вона є, так і особливостями модифікування цих природних компонентів, що пов'язані із джерелами реагентів, якими проводяться такі модифікації. Водночас наявне співвідношення між стабільними ізотопами в молекулі сполуки вже після моменту її створення може піддаватися дії чинників зовнішнього середовища, які здатні вплинути на склад ядра атома, не викликавши протікання ядерної реакції, наслідком якої є перетворення атома одного елемента на атом іншого — з іншими хімічними властивостями.

Сьогодні підхід з визначення ізотопного складу речовин методами мас-спектрометрії за ізотопним співвідношенням (*IRMS*), газової хроматографічної мас-спектрометрії за співвідношенням ізотопів (*GC-IRMS*) з успіхом використовують для розв'язання задач профілювання психотропних і наркотичних речовин як рослинного, так і синтетичного походження, що перебувають у незаконному обігу [1].

Оскільки ізотопний аналіз проводять з попереднім руйнуванням молекул речовини до оксидів елементів, із яких складаються молекули речовини, до того ж утрачаючи важливу інформацію, закладену в будові кожної молекули речовини, — інформацію щодо індивідуального співвідношення ізотопів елементів, із яких складається кожна така молекула і, відповідно, щодо співвідношень таких молекул, які загалом складають речовину. Тож ізотопний склад речовини, визначення якого

проводять цими потужними методами, не відображає її ізотопологічного складу. Ізотопологи — це молекули, які різняться лише за ізотопним складом (числом ізотопних заміщень), наприклад  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CH}_3\text{D}$ ,  $\text{CH}_2\text{D}_2$  [2]. Ізотопологічний склад сполуки визначає ізотопний малюнок її молекулярного іону, який спостерігається у мас-спектрі цієї сполуки. Ізотопний малюнок (*isotope pattern*) у мас-спектрометрії — це група (сукупність) піків іонів, які мають однакову хімічну формулу, але у своєму складі містять різні ізотопи елементів [3]. Як зазначено вище, під час проведення аналізу речовин поширеними сьогодні методами *IRMS* і *GC-IRMS* утрачають важливу інформацію, що може мати вагоме ідентифікаційне значення, а саме — розподіл ізотопів елементів між окремими молекулами речовини. Так, проведення ізотопного аналізу, на відміну від проведення аналізу зі встановленням ізотопологічного профілю речовини, не дає змоги розрізнити речовини, наприклад, одна з яких є еквімолярною сумішшю ізотопологів  $\text{Ph-CH}_2^{35}\text{Cl}$  і  $\text{Ph-CD}_2^{35}\text{Cl}$ , а інша — містить лише один з можливих ізотопологів —  $\text{Ph-CHD}^{35}\text{Cl}$ .

Такий аналіз — зі встановленням ізотопологічного профілю речовини — можна провести інструментальними хроматографічними методами, поєднаними з мас-селективним детектуванням. Ізотопологічний профіль речовини — це співвідношення між її окремими ізотопологами (співвідношення між інтенсивностями ліній у мас-спектрі її молекулярного іону  $M$ ,  $M+1$ ,  $M+2$ ,  $M+3$ ,  $M+4$ , ...,  $M+n$ , де  $M$  — молекулярна маса ізотополога, молекула якого побудована лише з найлегших ізотопів елементів,  $M+1$ ,  $M+2$ ,  $M+3$ ,  $M+4$ , ...,  $M+n$  — молекулярна маса ізотополога, молекула якого побудована з 1, 2, 3, 4, ...  $n$  ізотопів елементів, які на  $\sim 1$  Da важчі за найлегші ізотопи елементів — наприклад,  $\text{CH}_3^{35}\text{Cl}$ ,  $\text{CH}_2\text{D}^{35}\text{Cl}$ ,  $\text{CHD}_2^{35}\text{Cl}$ ,  $\text{CD}_3^{35}\text{Cl}$  або  $M$ ,  $M+2$ ,  $M+4$ ,  $M+6$ ,  $M+8$ , ...,  $M+2n$ , де  $M$  — молекулярна маса ізотополога, молекула якого побудована лише з найлегших ізотопів елементів,  $M+2$ ,  $M+4$ ,  $M+6$ ,  $M+8$ , ...,  $M+2n$  — молекулярна маса ізотополога,

молекула якого побудована з 1, 2, 3, 4, ... n ізотопів елементів, які на ~2 Da важчі за найлегші ізотопи елементів — наприклад,  $\text{CH}^{35}\text{Cl}_3$ ,  $\text{CH}^{35}\text{Cl}_2^{37}\text{Cl}$ ,  $\text{CH}^{35}\text{Cl}^{37}\text{Cl}_2$ ,  $\text{CH}^{37}\text{Cl}_3$ ).

Отже, проведення аналізу речовини зі встановленням ізотопологічного профілю може стати наступним значущим кроком у пошуку індивідуалізуючих ознак речовин, закладених безпосередньо у структурі їхніх молекул.

### **Перелік джерел посилання**

1. Ahmed R., Altamimi M. J., Hachem M. State-of-the-art analytical approaches for illicit drug profiling in forensic investigations. *Molecules*. 2022. Vol. 27. Art. 6602. DOI: 10.3390/molecules27196602 (дата звернення: 07.09.2024).
2. Isotopologue. *IUPAC Compendium of chemical terminology*. 3<sup>rd</sup> ed. International Union of Pure and Applied Chemistry, 2006. Online version 3.0.1. 2019. DOI: 10.1351/goldbook.I03351 (дата звернення: 07.09.2024).
3. Isotope pattern. *IUPAC Compendium of chemical terminology*. 3<sup>rd</sup> ed. International Union of Pure and Applied Chemistry, 2006. Online version 3.0.1. 2019. DOI: 10.1351/goldbook.I03330 (дата звернення: 07.09.2024).