

ЯМР-спектроскопія як один з напрямів розвитку інструментальних методів аналізу органічних сполук в експертизі на прикладі аналізу ефедрину / псевдоефедрину

Олександр Лагута

доктор філософії з хімії, старший судовий експерт сектору дослідження наркотичних засобів, відділ дослідження наркотичних засобів, психотропних речовин, їх аналогів та прекурсорів, сильнодіючих та отруйних лікарських засобів, лабораторія досліджень матеріалів, речовин і виробів, Дніпропетровський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр Міністерства внутрішніх справ України, м. Дніпро, Україна, ORCID: <https://orcid.org/0009-0009-5120-8243>, e-mail: alexandr.banshee@gmail.com

Олександр Родигін

судовий експерт сектору дослідження сильнодіючих та отруйних лікарських засобів, відділ дослідження наркотичних засобів, психотропних речовин, їх аналогів та прекурсорів, сильнодіючих та отруйних лікарських засобів, лабораторія досліджень матеріалів, речовин і виробів Дніпропетровського науково-дослідного експертно-криміналістичного центру Міністерства внутрішніх справ України, м. Дніпро, Україна, ORCID: <https://orcid.org/0009-0001-5425-3084>, e-mail: R-O.A@outlook.com

Розвиток інструментальних методів аналізу в експертизі залишається одним з найважливіших питань науково-практичної діяльності. Таким прикладом розвитку є ЯМР-спектроскопія як метод аналізу наркотичних засобів, психотропних речовин, їх аналогів і прекурсорів, сильнодіючих та отруйних лікарських засобів у криміналістиці.

Ключові слова: ЯМР-спектроскопія; органічні сполуки; аналіз; ефедрин; псевдоефедрин.

NMR-Spectroscopy as a Strategic Advancement in Instrumental Analysis of Organic Compounds in Forensic Science: A Case Study of Ephedrine/Pseudoephedrine Analysis

Oleksandr Lahuta, Oleksandr Rodyhin

The development of instrumental analytical methods remains one of the most critical issues in scientific and practical forensic activity. A prime example of such advancement is NMR-spectroscopy, employed as a method for analyzing narcotic drugs, psychotropic substances, their analogues and precursors, as well as potent and toxic medicinal products in forensics.

Keywords: NMR-spectroscopy; organic compounds; analysis; ephedrine; pseudoephedrine.

В експертній діяльності для аналізу наркотичних засобів, психотропних речовин, їх аналогів і прекурсорів, сильнодіючих та отруйних лікарських засобів застосування інструментальних методів аналізу є основним напрямом діяльності експертів. Водночас ідентифікація окремих стереоізомерів сполук викликає труднощі під час застосування методів газової хроматографії, тож застосування методу спектроскопії ядерного магнітного резонансу (далі — ЯМР-спектроскопія) стає дедалі актуальнішим.

Метод ЯМР-спектроскопії ґрунтується на переході між дискретними енергетичними рівнями ядер у зовнішньому магнітному полі. Атомні ядра мають внутрішній момент кількості руху — спин (I), що визначається від-

повідним квантовим числом. Залежно від природи ізотопу, це число може набувати цілих або напівцілих значень (0, 1/2, 1, 3/2 тощо). Саме наявність ненульового спіну визначає здатність конкретного ядра до резонансного поглинання енергії.

Для проведення рідкофазного ЯМР-аналізу зразки розчиняють у спеціалізованих дейтерованих розчинниках. Заміна протію на дейтерій є критично важливою для мінімізації фонового поглинання: це запобігає появі інтенсивних сигналів розчинника, які здатні маскувати слабкі резонансні піки досліджуваної сполуки. Калібрування шкали хімічних зсувів здійснюють за допомогою внутрішнього стандарту або за залишковими протонними сигналами самого розчинника.



Окрім аналітичної чистоти, дейтеровані розчинники забезпечують функцію стабілізації резонансних умов — «локування» (англ. *field-frequency lock*). Сучасні спектрометри послуговуються сигналом ядра ^2D (дейтерію) для автоматичної корекції дрейфу магнітного поля. Локування є обов'язковим етапом налаштування приладу, оскільки гарантує високу роздільну здатність, відтворюваність результатів і мінімальну ширину ліній у спектрі [1].

Для аналізу нерозчинних сполук або вивчення речовин у нативному стані застосовують твердофазну ЯМР-спектроскопію. Цей метод технічно складніший, оскільки у твердому тілі відсутнє ізотропне усереднення взаємодій, яке в розчинах забезпечується швидким броунівським рухом молекул. Значне розширення спектральних ліній зумовлює необхідність обертання зразка під «магічним кутом» (MAS) із частотою в кілька десятків кілогерц. Попри певні труднощі під час детекції протонів (H), метод є незамінним для дослідження просторової структури мембранних білків та інших складних систем, що потребують повного ізотопного мічення ядрами ^{13}C та ^{15}N [2].

Розглянемо можливості цього методу на прикладі диференціації ефедрину та псевдоефедрину. Диференціація ефедрину та псевдоефедрину методом ЯМР-спектроскопії є класичним прикладом ідентифікації діастереомерів. Оскільки ці сполуки мають однакову хімічну будову, але різняться конфігурацією замісників біля хіральних центрів (C_1 і C_2), магнітне оточення їхніх ядер не є еквівалентним. Це зумовлює характерні відмінності у спектрах, що дає змогу однозначно ідентифікувати кожну з речовин без попереднього розділення суміші чи дериватизації (хімічної модифікації) [3].

Основним діагностичним критерієм у спектроскопії ^1H ЯМР є константа спин-спінової взаємодії ($^3J_{\text{H}_1\text{H}_2}$) між протонами при першому та другому атомах Карбону. Для ефедрину характерне значення цієї константи в межах 3—5 Гц, тоді як для псевдоефедрину воно є значно вищим і становить приблизно 8—9 Гц. Така розбіжність зумовлена величиною дієдричного кута між протонами:

у псевдоефедрину вони перебувають у переважній анти-перипланарній конформації, що (згідно з рівнянням Карплуса) зумовлює максимальне значення константи.

Окрім констант взаємодії, спостерігаються суттєві відмінності в хімічних зсувах (δ). Сигнали бензильного протона ($\text{H}-\text{C}_1$) і протона при атомі Нітрогену ($\text{H}-\text{C}_2$) у псевдоефедрину зазвичай зміщені в сильніше поле (менші значення ppm) порівняно з ефедриним. Зокрема, у дейтерованому розчиннику з додаванням кислоти сигнал $\text{H}-\text{C}_1$ ефедрину резонує в області 4,7—4,8 ppm, тоді як у псевдоефедрину він фіксується в межах 4,2—4,4 ppm [4].

Сигнали метильних груп при атомі азоту та вуглецю також демонструють невеликі, але відтворювані розбіжності, що стає додатковим підтвердженням під час аналізу.

Перелік джерел посилання

1. Методичні рекомендації до вивчення теми «Спектроскопія ЯМР» з дисципліни «Фізичні методи дослідження речовини» / укладачі: доц. Юрченко О. М., проф. Кормош Ж. О., доц. Савчук Т. І., доц. Корольчук С. І. Луцьк, 2021. 105 с. URL: <https://evnuir.vnu.edu.ua/server/api/core/bitstreams/4adbc4c3-de6a-4110-8c33-5e6e285daf5e/content> (дата звернення: 12.04.2026).
2. Claridge T. D. W. *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*. Elsevier Science, 2016. 542 p. DOI: 10.1016/c2015-0-04654-8 (дата звернення: 12.04.2026).
3. Recommended Methods for the Identification and Analysis of Amphetamine, Methamphetamine and their Ring-substituted Analogues in Seized Materials / United Nations. Office on Drugs and Crime : web. New York, 2006. 77 p. URL: <https://www.unodc.org/unodc/en/scientists/recommended-methods-for-the-identification-and-analysis-of-amphetamine--methamphetamine-and-their-ring-substituted-analogues-in-seized-materials-.html> (дата звернення: 12.04.2026).
4. Mickolas L. J., Bowen A. M., Hitchcock M. L. Forensic applications of high-resolution NMR spectroscopy in the identification of novel psychoactive substances and the quantitation of methamphetamine. *Magnetic Resonance in Chemistry*. 2021. Vol. 61. Is. 2. Pp. 83–94. DOI: 10.1002/mrc.5233 (дата звернення: 12.04.2026).