

Anyagvizsgálati módszerek a bűnüldözésben

Kábítószerek III.

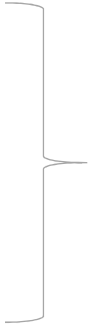

Kábítószerek összehasonlító vizsgálatai,
az összehasonlítás elve, értékelési
módszerek

2020. március 3.

Rompos Éva

Nemzeti Szakértői és Kutató Központ
Kábítószervizsgáló Szakértői Intézet

A leggyakoribb szakkérdések

- A lefoglalt anyag tartalmaz-e kábítószer új pszichoaktív anyagot kábítószer prekuzort?  kvalitatív analízis
- Ha igen, mennyit?  kvantitatív analízis
- Lehet-e a két különböző személytől vagy helyszínen lefoglalt kábítószer közös eredetű?

A kérdés indokoltsága

Btk. 461. §	Csekély (gramm)	Alapeset (gramm)	Jelentős (gramm)	Különösen jelentős (gramm)
Amfetamin-bázis	0 - 0,5	0,5 - 10	≥10	≥100
Heroin-bázis	0 - 0,6	0,6 - 12	≥12	≥120
MDMA-bázis	0 - 1	1 - 20	≥20	≥200
Kokain-bázis	0 - 2	2 - 40	≥40	≥400
Totál-THC	0 - 6	6 - 120	≥120	≥1200

Btk. 176.§	Kábítószer-kereskedelem	5 év / életfogytiglan
Btk. 177.§	18. életévét betöltött személy	5 év / életfogytiglan
Btk. 178.§	Kábítószer-birtoklás	2 év / 15 év

Minősítő körülmény: üzletszerűen, bűnszövetségben, 18 éven aluli személy felhasználásával vagy számára, jelentős vagy különösen jelentős mennyiségre, ...

A vizsgálatok célja

- **Bizonyíték** a terjesztésre, átadásra: kapcsolat keresése különböző lefoglalások, bűnözői csoportok között
- A további **nyomozáshoz információ** adása: a kábítószer elosztási, értékesítési útvonalának a feltérképezése
- A forrás **felderítése**: földrajzi értelemben, illetve az illegális gyártóhely vagy a „vegyész” megtalálása
- **Trendek** feltérképezése: új prekurzorok, alkalmazott vegyszerek monitorozása

Szakértői megközelítés

- Kirendelői információk az ügy háttéréről
- A vonatkozó szakirodalom tanulmányozása
- Saját kémiai intelligenciánk bevetése

főkomponensek koncentrációja

hatóanyagok, adalékanyagok, hígító anyagok

nyomszennyezők jelenléte, aránya

gyártási melléktermékek, bomlástermékek, fémek, oldószermaradványok

egyéb jellemzők

elemösszetétel, sóforma, izotóparány, sztereoizomerek aránya, kristályszerkezet, botanikai jellemzők, csomagolás, szín, állag, eszköznyom

Információszerzés az „anyagról”

- Miből, hogyan azaz milyen eljárással, hol állították elő?
- Hol, milyen körülmények között, mennyi ideig tárolták?
- Mivel és milyen arányban hígították?
- Hogyan és mivel adagolták, préselték tömbökké, tablettává?
- Mivel és mibe csomagolták?

„The appearance of 999 is said to stem directly from the surrender of Golden Triangle drug lord Khun Sa, one of the world's largest exporters of high-quality heroin.”

<http://edition.cnn.com/WORLD/9607/20/heroin.thailand/index.html>



Mákkoncentrátum előállítás házi körülmények között



Szőnyegbe rejtett heroin



Szőnyegbe rejtett heroin

	A belső szál hossza (cm)	Az egymás mellett található 10 szálban lévő por nettó össztömege (gramm)	A porok átlagos heroin-bázis koncentrációja (tömeg%)	A kibontott 10 szálban lévő por heroin-bázis tartalma (gramm)
3.1.	61-65	11,85	79,4±1,9	9,41±0,23
3.2.	57-65	12,18	67,56±0,46	8,23±0,06
3.3.	58-69	12,14	66,81±0,97	8,11±0,12
4.1.	62-68	12,81	67,2±1,6	8,61±0,20
4.2.	63-72	12,15	68,23±0,85	8,29±0,10
4.3.	53-63	10,40	75,1±1,7	7,81±0,18
Összesen:	-	71,53 gramm	-	50,46±0,67 gramm

„A 3. számú szőnyegben lévő heroin-bázis mennyisége – a szálak száma és az egy szálban lévő heroin-bázis átlagos mennyisége alapján - 717±52 grammra, míg a 4. számú szőnyegben lévő heroin-bázis mennyisége 416±31 grammra, azaz összesen **1133±81 grammra becsülhető.**”

„Védjeggyel” ellátott hasis téglák



Mikor lehet/érdemes összehasonlító vizsgálatokat végezni?

Korlátozottan alkalmas összehasonlító vizsgálatra

- anyagmaradvány
- kis mennyiségű (néhány grammnál kevesebb) anyag

Egyelőre minimális eredmény várható

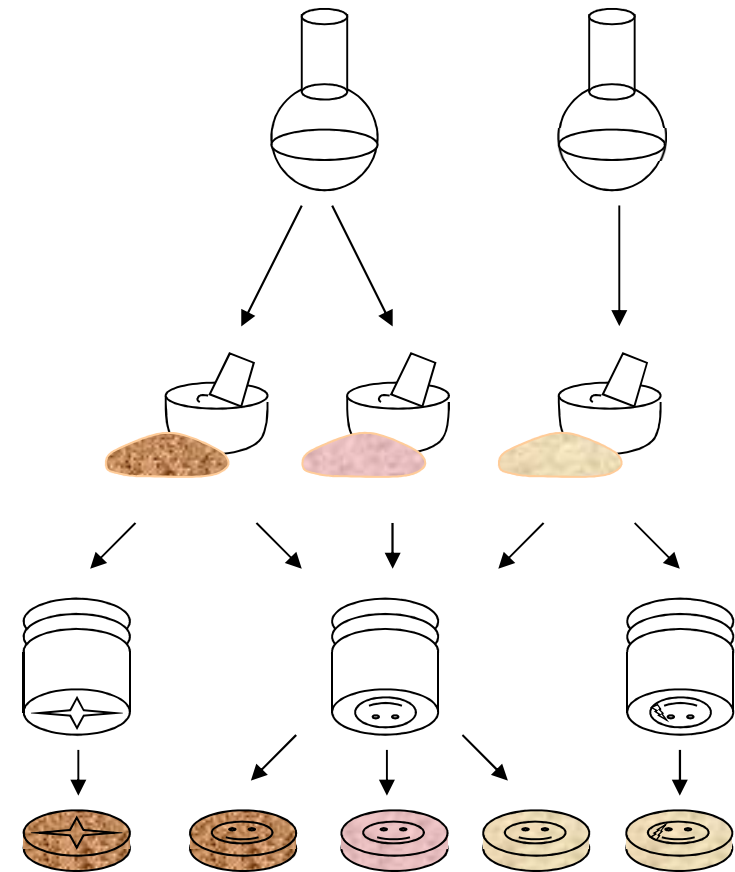
- növényi kábítószeres esetén (pl. mák, kender*)
- designer drogok esetén (még nagyon kevés a rendelkezésre álló információ)

*A jövő: <https://phylos.bio/galaxy>

Mérlegelendő szempontok

Ecstasy tabletták

- alapanyag szintézis
 - alapanyag gyártási melléktermékek
 - katalizátor maradvány
- hígító és tablettázó anyagok
 - komponensek, koncentrációk
- tablettázás
 - átmérő, lenyomat, nyomófej-hibák



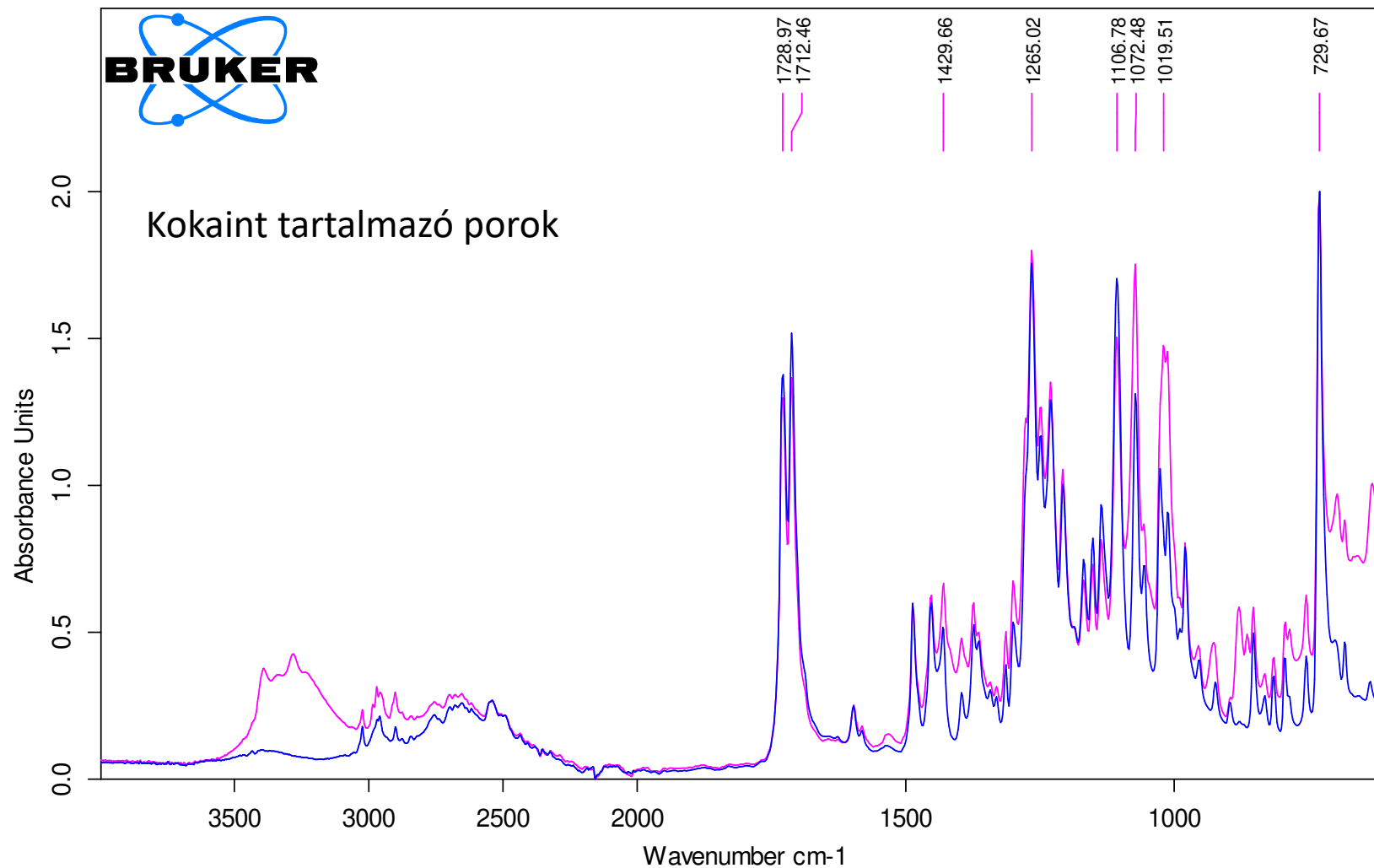
Alkalmazható analitikai technikák

- a rutin analitikai eljárások eredményei
TLC, FTIR, GC-MS, HPLC-DAD
- LC-MS/MS, LC-qTOF, GC-IRMS, XRF, elektronmikroszkóp,
ICP-MS, HS-GC/MS, CE-DAD, stb.

Nem mellőzhető azonban: a „készítmény” fizikai sajátosságai azaz a külső megjelenés (szín, állag, aprítottság foka), valamint a nedvességtartalom, oldhatóság, olvadáspont, sóforma, forgatóképesség, stb. meghatározása, kategorizálása, a lefoglalás ideje, stb.

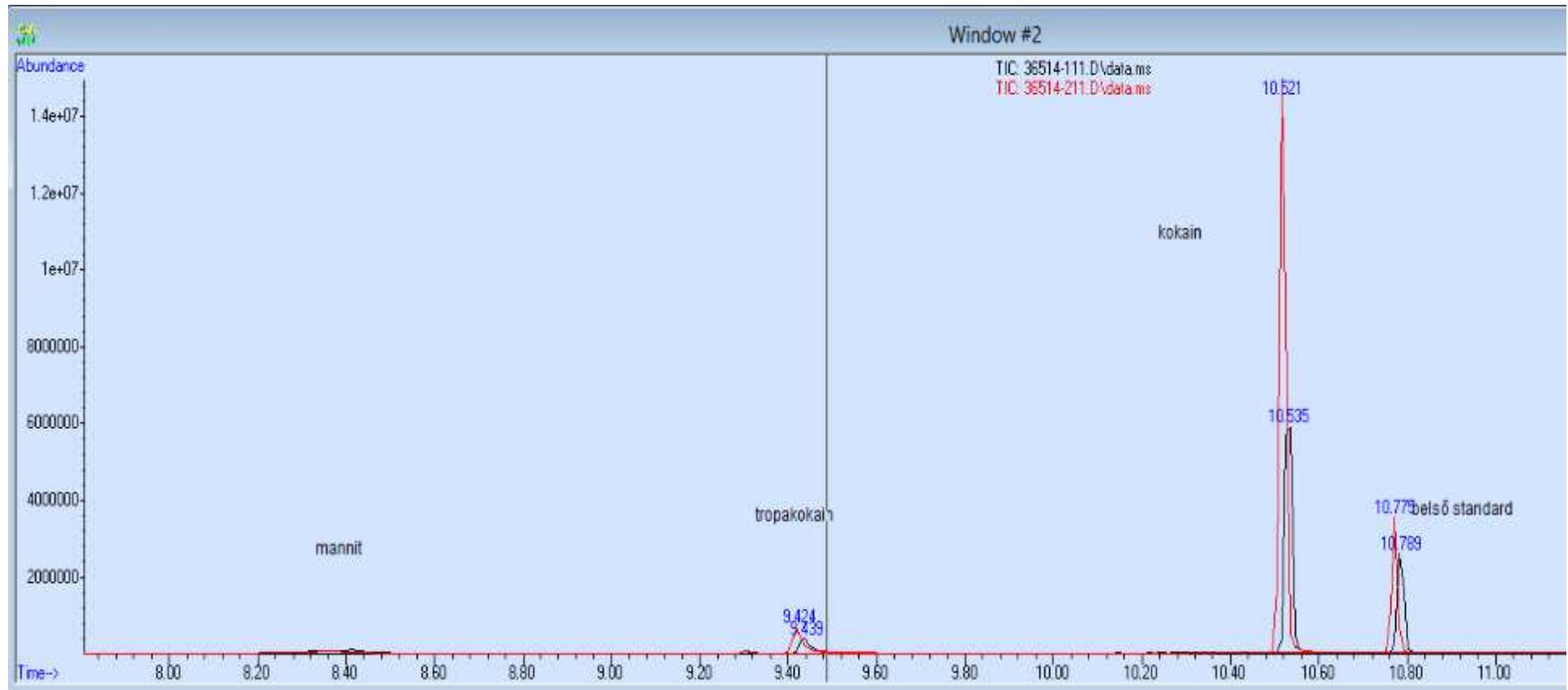


Infravörös spektroszkópia

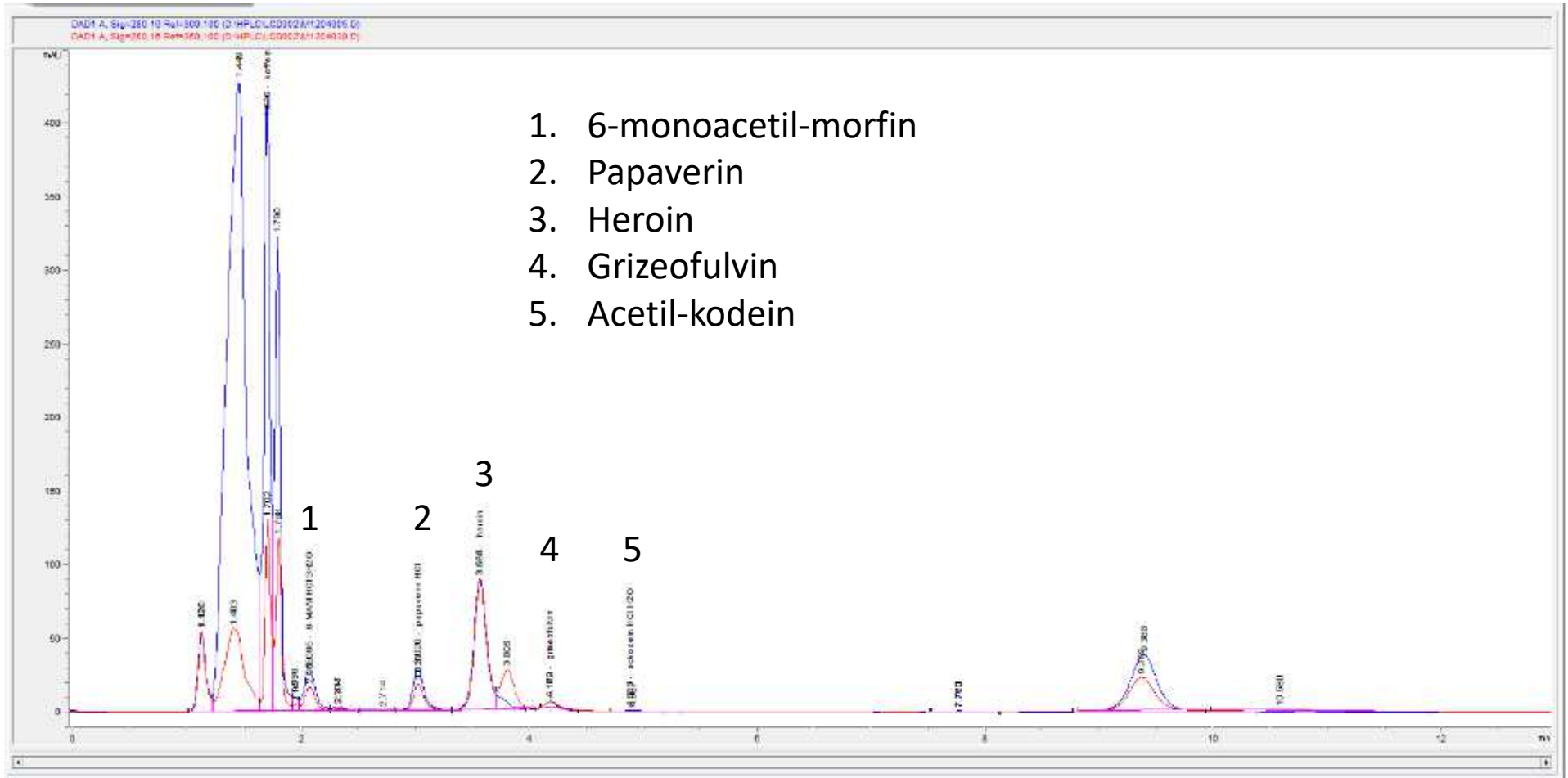


M:\INFRA\B_INF-001\Meresek\2014\23844\2.0	2.	fehér por	2014.12.05
M:\INFRA\B_INF-001\Meresek\2014\23329-4\3.0	3.	fehér tömbös anyag	2014.12.12

Gázkromatográfia-tömegspektrometria



Nagyhatékonyságú folyadékkromatográfia



Stabil izotóparány-mérő tömegspektrométer

Izotóparány-mérő tömegspektrometria (GC-IRMS)

A szén izotópjainak mérése esetén a gázkromatográfiásan elválasztott szerves komponenseket elégetjük, széndioxid és víz keletkezik. A melléktermékként keletkező víz az égéstermékéből eltávolítjuk. A különböző tömegszámú szén tartalmazó széndioxid molekulák ionizálásra, majd mágneses szektor analizátorral tömegspektrometriás detektálásra kerülnek, melynek eredményeként a szénizotópok aránya számolható.

$\delta^{13}\text{C}$: Az elsődleges referenciaanyag szerint kalibrált referenciaanyag (CO_2 gáz) és a vizsgált komponens izotóparányának különbségét jellemző 'delta' érték.

A standard nemzetközileg meghatározott anyag izotóparánya: CaCO_3 , Belemnite from the American fossiliferous limestone, Peedee-formation, South Carolina, $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ izotóparány = 0,011237

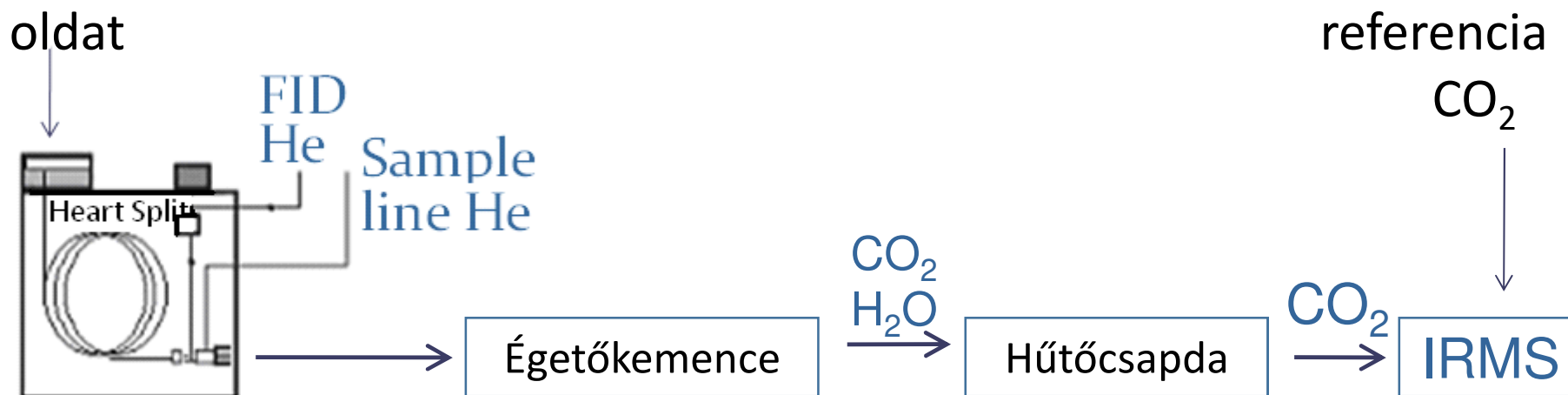
Rendszer ellenőrzőanyag Franciaországból: koffein (ismételhetőség).

GC-IRMS

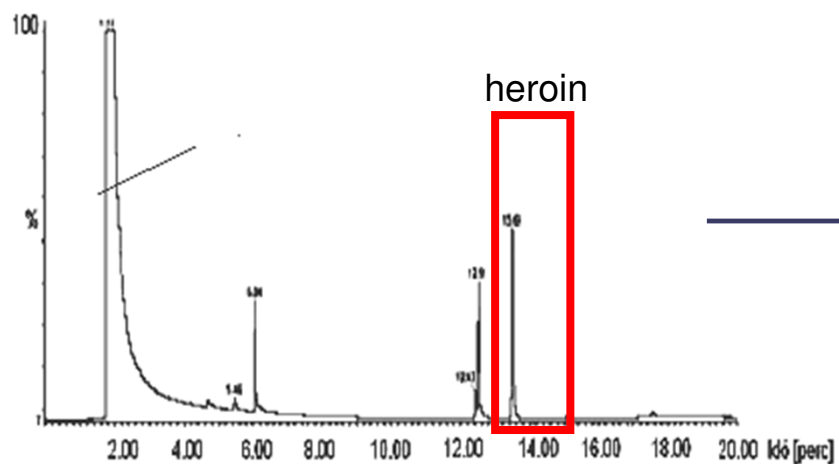


1. Mintaadagoló
2. Gázkromatográf
3. Égetőkemence
4. Kifagyasztó (N₂)
5. Referenciagáz injektor
6. CO₂ palack
7. IRMS GV ISOPRIME

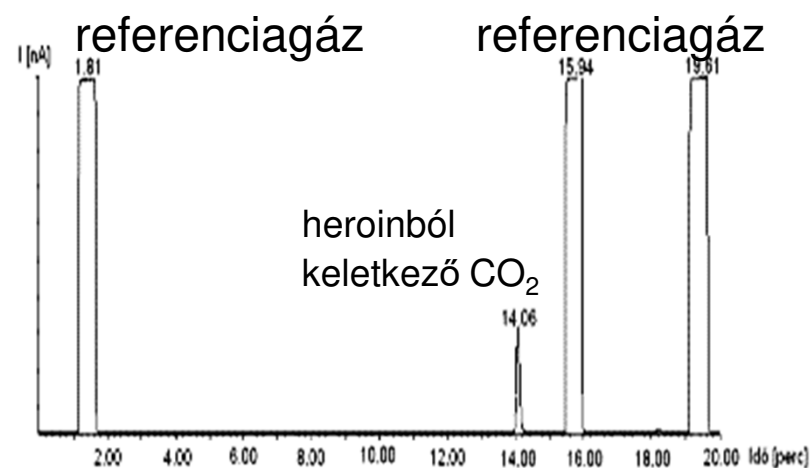
GC-IRMS



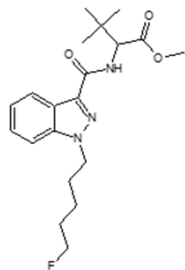
GC kromatogramm



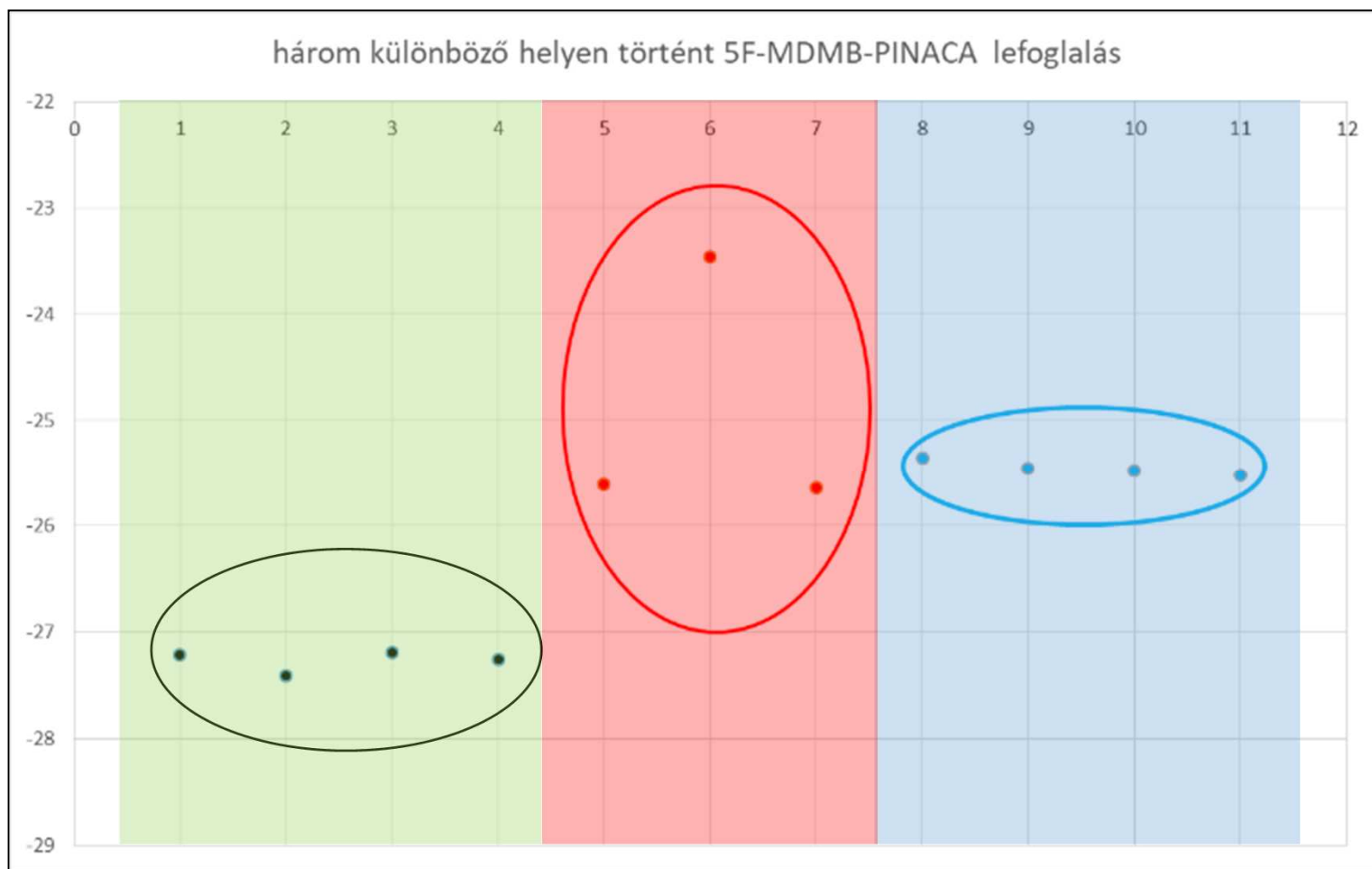
IRMS kromatogramm



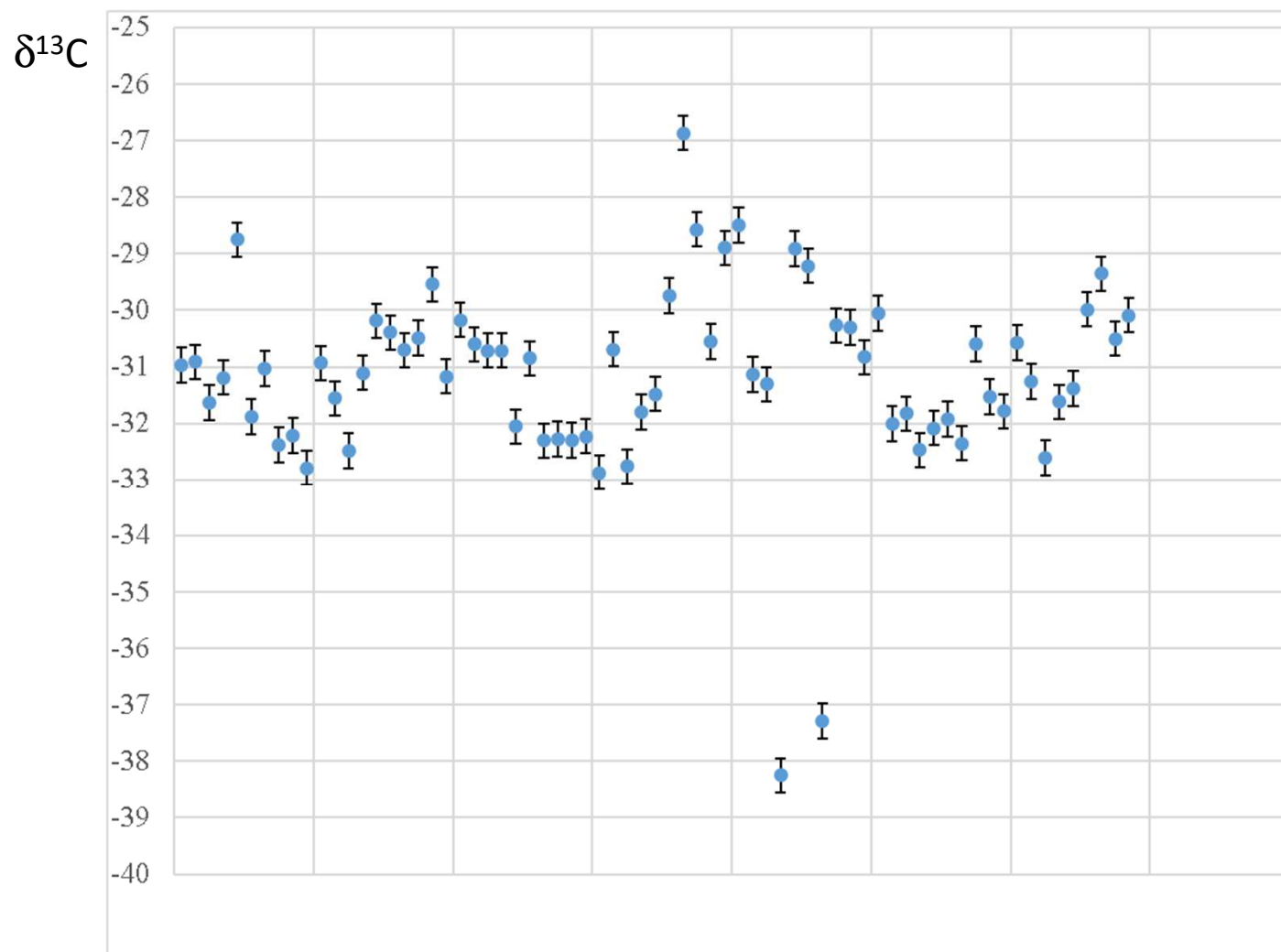
GC-IRMS



$\delta^{13}\text{C}$



GC-IRMS



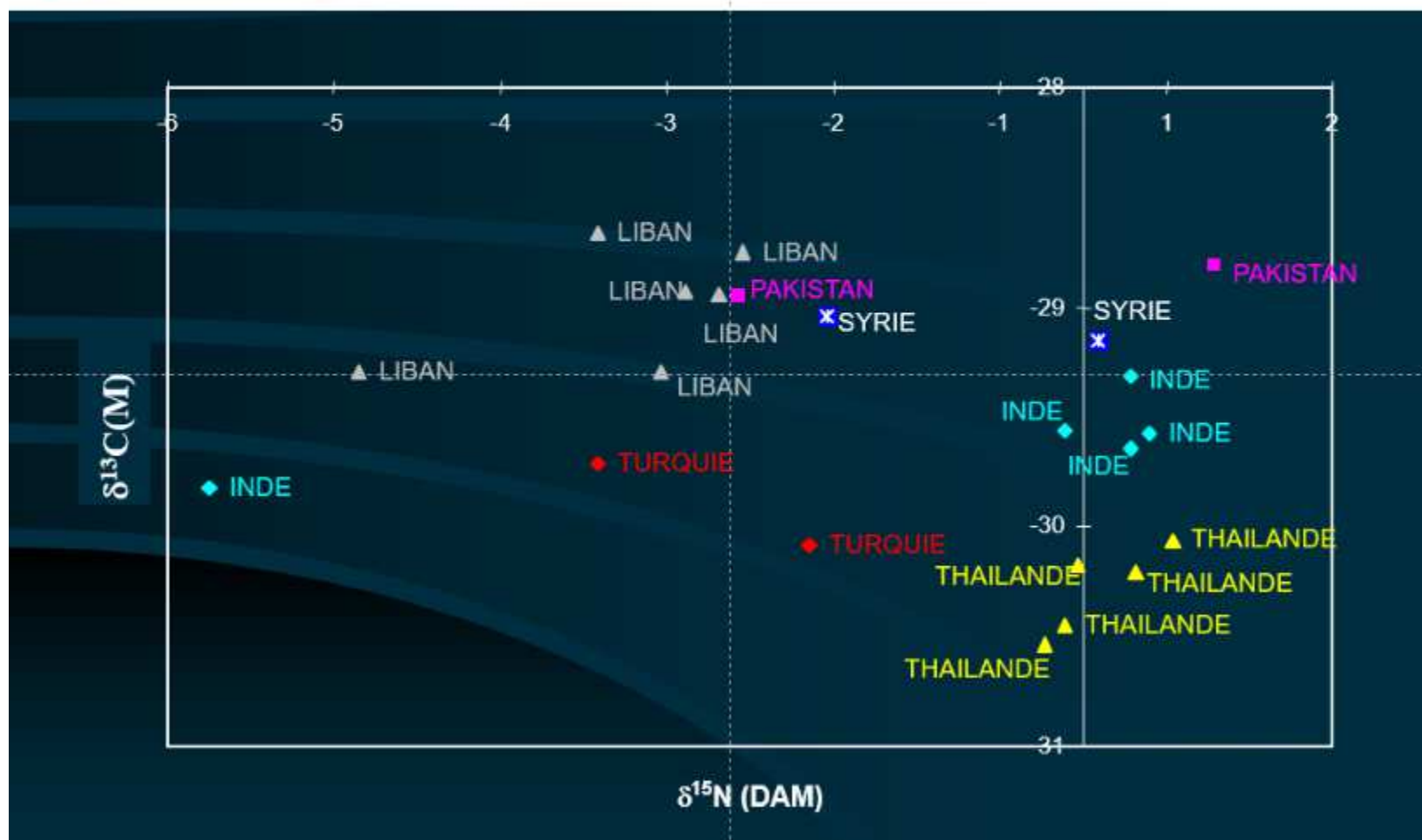
2017/2018-ban Budapesten és Pest megyében lefoglalt amfetamint tartalmazó porok

GC-IRMS

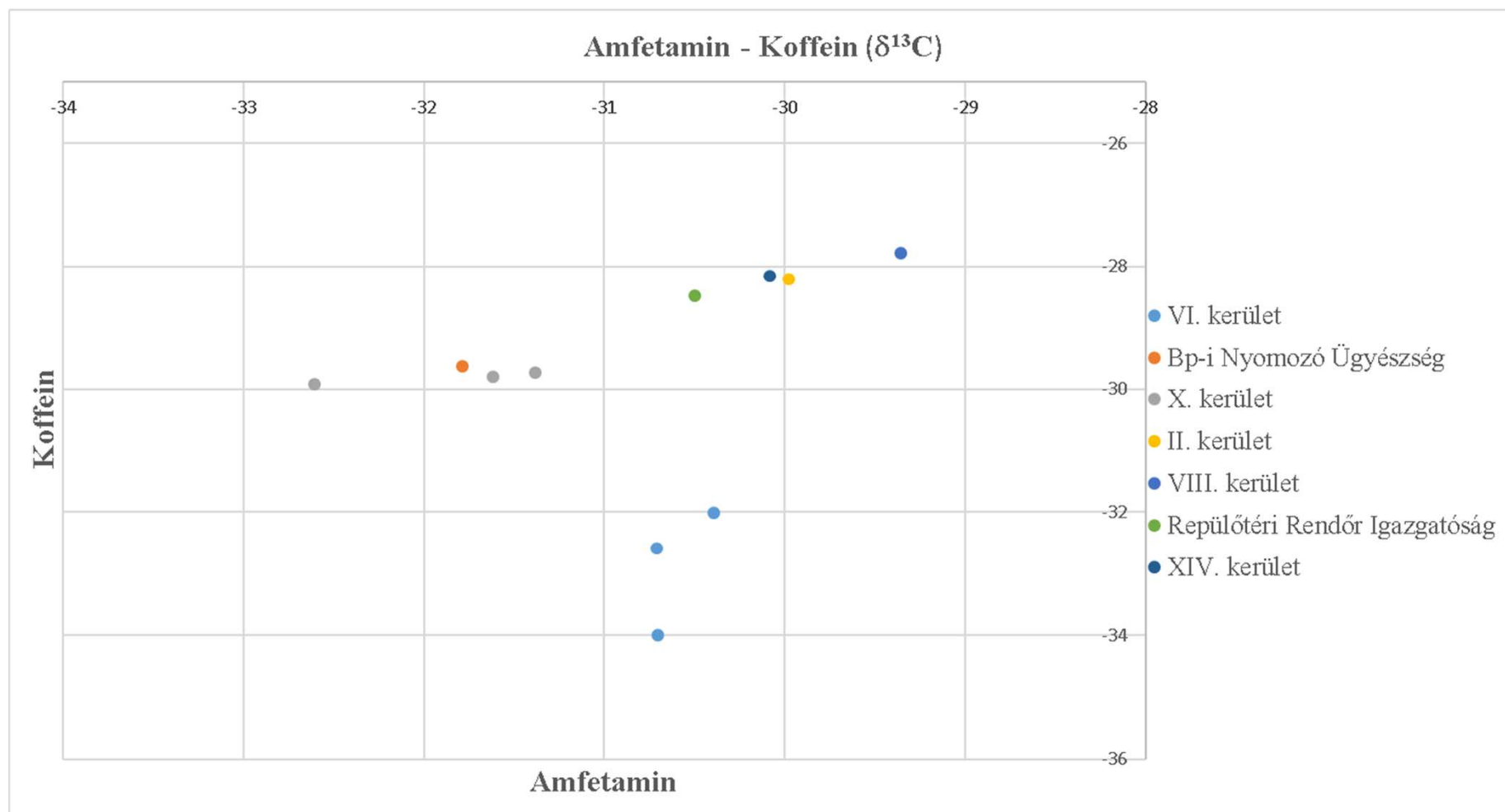
A Heroin származási helyének behatárolására



Geographical origin



GC-IRMS



Amfetamint és koffeint is tartalmazó porok $\delta^{13}\text{C}$ eredményei

Röntgenfluoreszcens spektroszkópia (XRF)

A mintát nagy energiájú (1-50 keV) röntgennyalábbal besugározva abból másodlagos röntgensugárzás lép ki. A másodlagos röntgensugárzásnak a minta elemeire jellemző energia-eloszlása (spektruma) van. A spektrum alapján az anyag elemi összetétele meghatározható (Nátriumtól – Uránig). Nem destruktív, gyors vizsgálati módszer.

Sóforma és a szervesetlen szennyezők meghatározása
például az MDMA előállítás szintézis útjainak a
beazonosításához

A Leuckart szintézisre jellemző elemek: Cl, S, Na, Mg, K

A nitrosztirén útra jellemző: Al, Li, Hg, Na, Cl, S, Mg, Ni, Pd, Pt, Cu,

A redukív aminálásra: Cl, S, Na, Mg, K,

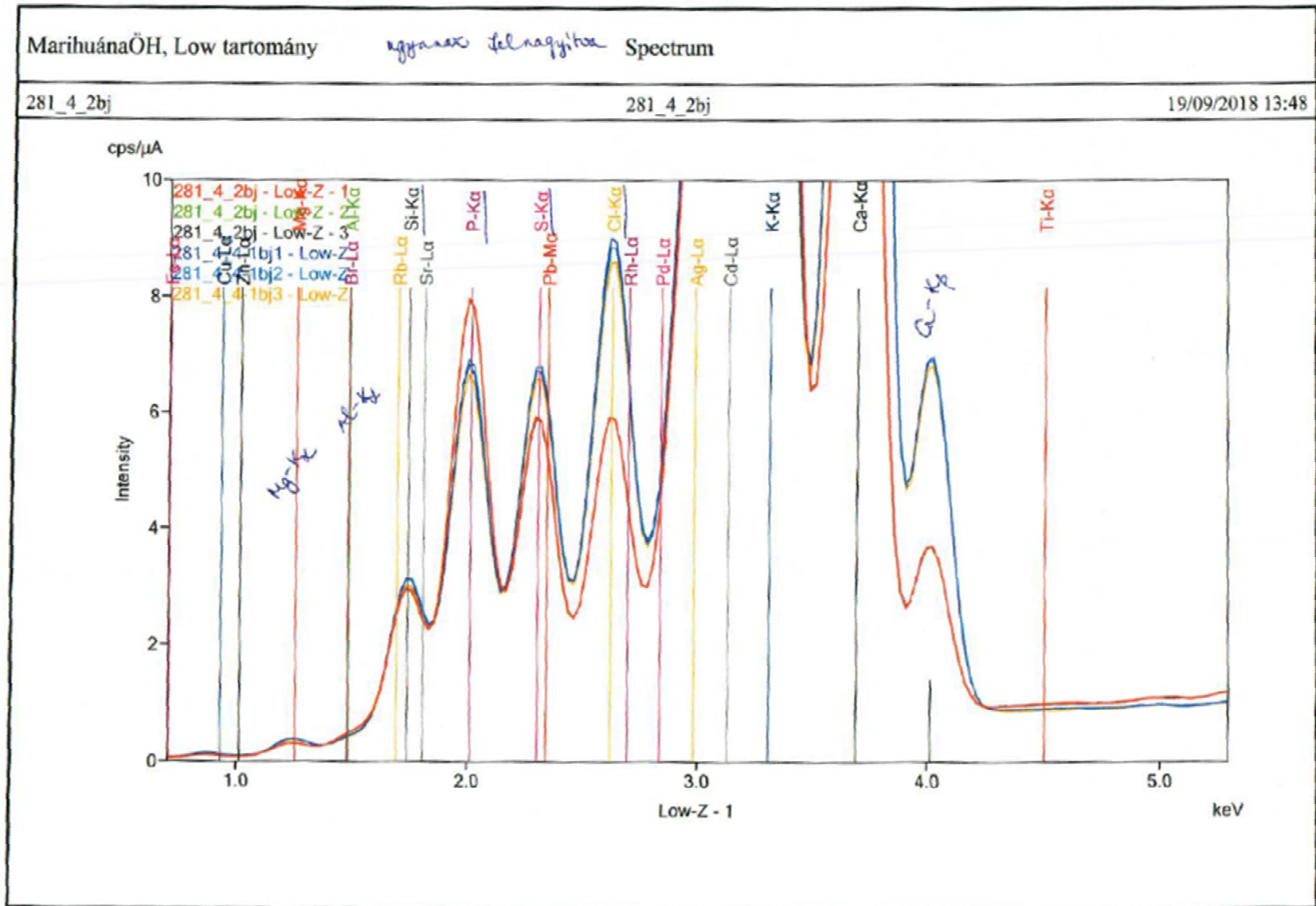
az un. „hideg eljárásra”: B (NaBH_4)

PtO_2 katalizátorral: Pt

HgCl_2 és Al fólia („sün módszer”): Cl, Hg, Al

Szafrolból: Br, Cl, S, Na, Mg, K

XRF



Felmerülő problémák

- A minta inhomogenitása: csak akkor lehet megalapozott a véleményalkotás, ha a vizsgált kémiai jellemző változása az egy tételből vett minták között kisebb, mint a különböző tételek között (sarzs, gyártási tétel).
- Agresszív hígító anyag: aszkorbinsav, paracetamol
- A mérés során bekövetkező változás az anyagban
- Hiteles, különböző helyekről származó autentikus, összehasonlító minta hiánya
- Többdimenziós adathalmaz kiértékelése



Profilírozás, harmonizált eljárások



UNITED NATIONS
New York, 2005

METHODS FOR

IMPURITY PROFILING OF
HEROIN AND COCAINE

- A profilírozás idő, ember és eszközigényes tevékenység
- Használata egységes műszerparkon, mérési és értékelési metodikán, valamint átgondoltan felépített és naprakészen karbantartott adatbázison alapul
- Használata, vagyis a befektetett energia a nagy mennyiségben lefoglalt készítmények (pl. heroin és kokain) esetében „térül” meg

Profilírozás, harmonizált eljárások

Table 1

List of the targeted ions for each compound extracted for the determination of the chemical signature of heroin samples as well as for the main cutting agent.

Heroin samples	Peak no.	RRT	Target	Qualifiers
Heneicosane (internal standard)		1.000 (RT 10.606)	57	71, 85
Meconine (MEC)	1	0.613	194	165
Acetylcodeine (COD)	2	1.468	341	282, 229
Acetylthebaol (THEB)	3	1.465	254	239
6-Monoacetylmorphine (MAM)	4	1.509	399	340, 287
Diamorphine (DAM)	5	1.595	369	327, 268
Papaverine (PAP)	6	1.777	338	324
Noscapine (NOSC)	7	2.143	220	205
Phenacetin		0.470	236	251, 222, 162
Paracetamol		0.500	295	280, 206
Fructose		0.702	217	437, 257
Caffeine		0.715	194	109
Glucose		0.799	204	217, 231, 191
Mannitol		0.780	319	421, 345, 305
Gluconic acid		0.924	292	333, 359
Inositol		1.015	305	318, 191, 265
Lactose		1.495	204	361, 217, 191
Sucrose		1.596	361	437, 271, 217
Griseofulvin		1.712	352	321, 310, 284

Table 2

List of the targeted ions for each compound extracted for the determination of the chemical signature of cocaine samples as well as for the main cutting agent.

Cocaine samples	Peak no.	RRT	Target	Qualifiers
Heneicosane (internal standard)		1.000 (RT 9.303)	57	71, 85
Ecgonine methylester (EME)	1	0.340	82	96, 147
Ecgonine (EC)	2	0.402	82	96, 182
Tropacocaine (TROPA)	3	0.812	124	245, 82
Cocaine (COC)	4	1.299	182	82, 303
Benzoylcocaine (BENZO)	5	1.410	240	82, 105
Norcocaine (NOR)	6	1.442	240	105
Cis-cinnamoylcocaine (CIS)	7	1.651	182	82, 96
Trans-cinnamoylcocaine (TRANS)	8	1.915	182	82, 131
Trimethoxycocaine (TRIME)	9	2.445	182	393, 94
Malic acid		0.349	233	245, 335, 190
Nicotinamide		0.300	179	136, 193
Methylephedrin		0.312	72	163, 102
1-4 Dimethylterephthalate		0.289	163	194, 135
Acetylsalicylate		0.329	195	210, 177, 135
Creatinin		0.353	115	171, 329
Ephedrin		0.353	130	147, 294
Diethyl phthalate		0.471	149	177, 105
Phenacetin		0.353	236	251, 162
Phenylalanin		0.450	218	192, 266, 100
Paracetamol		0.373	206	280, 206

Heroin

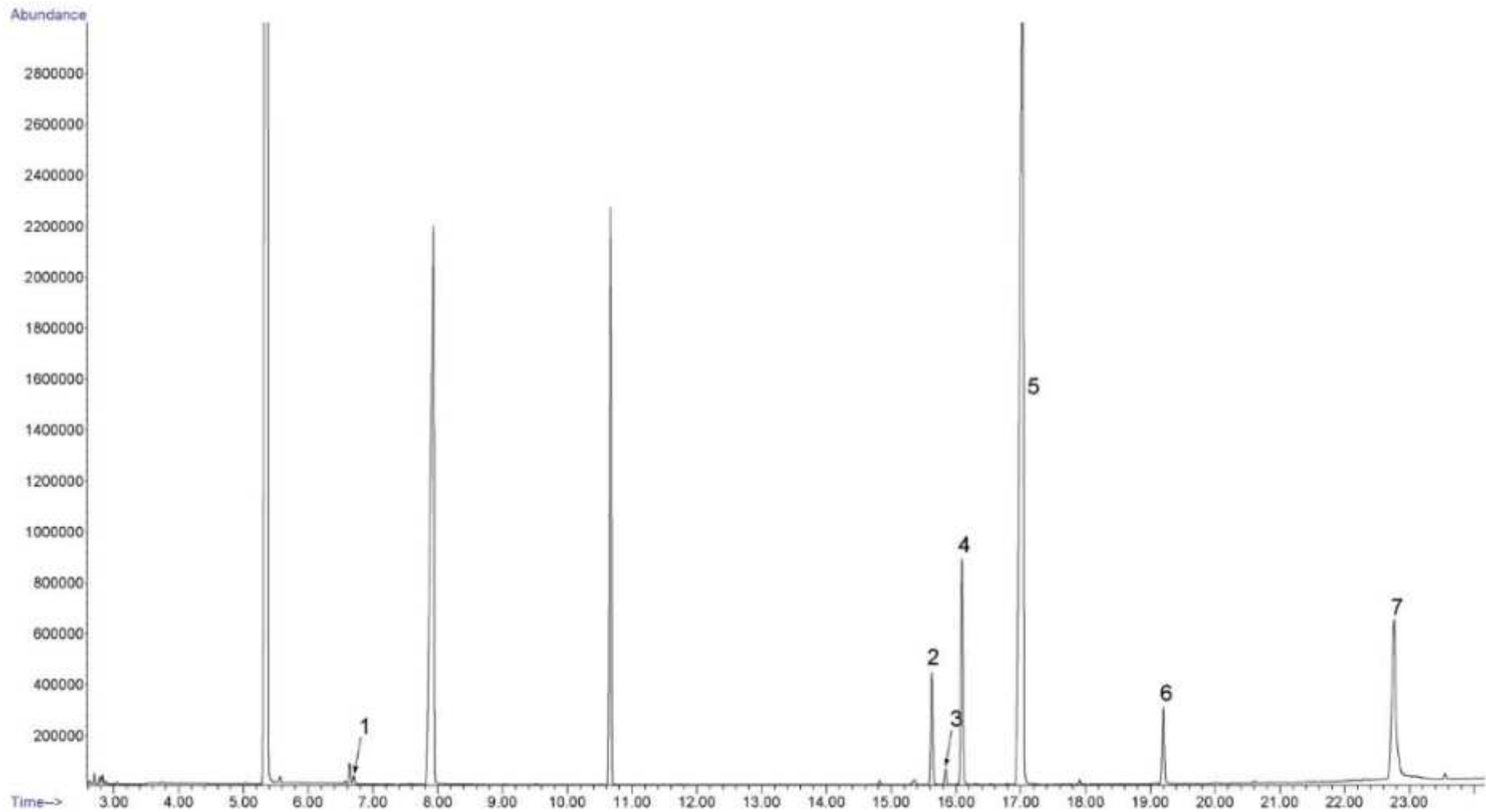
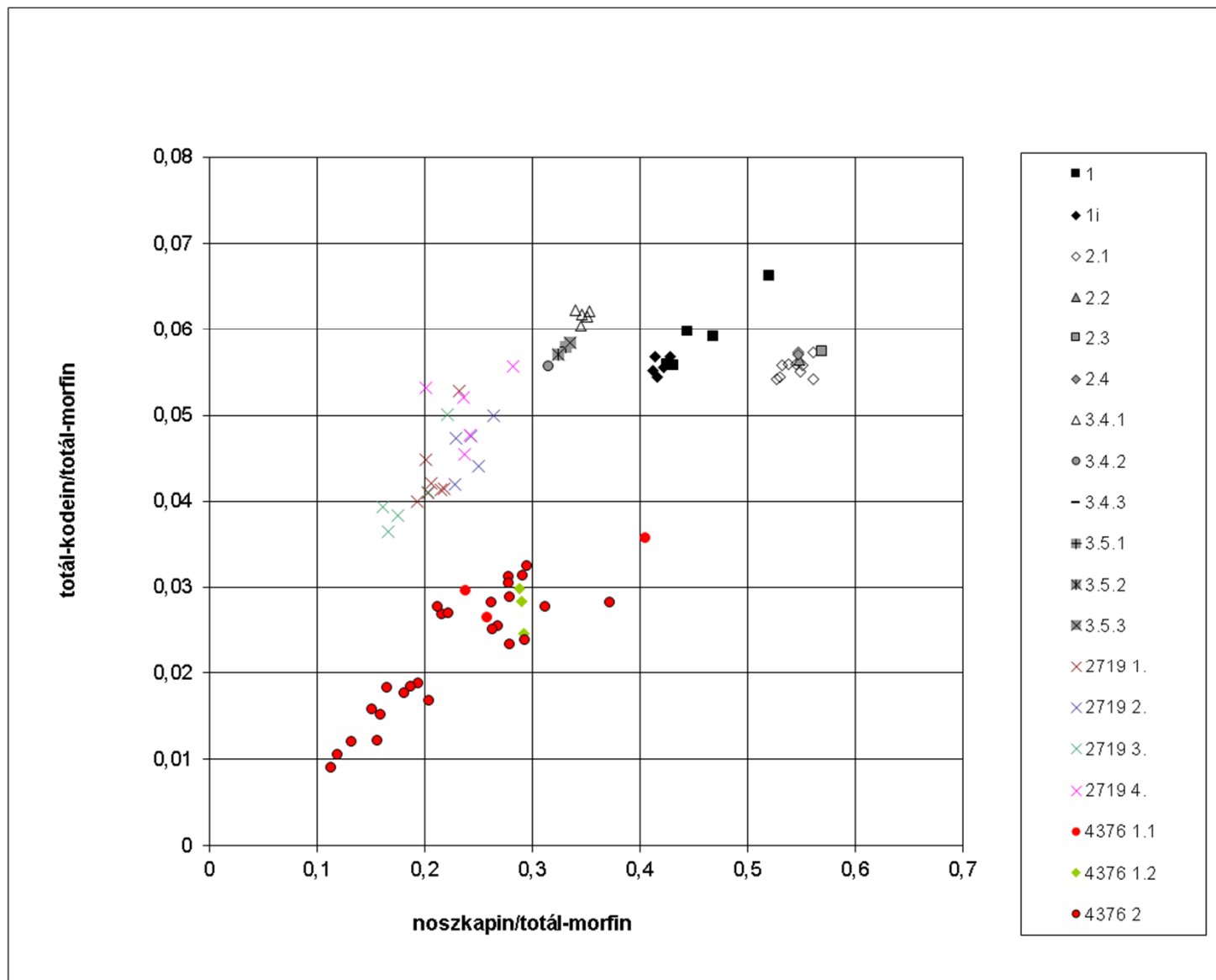


Fig. 1. Chromatogram of a typical heroin sample. Number on the chromatogram refers to Table 1.

Heroin



Kokain

- INTRA variabilitás: ugyanannak a lefoglalásnak a mintáiból nyert párhuzamos eredmények
- INTER variabilitás: két, biztosan kapcsolatban *nem* lévő lefoglalás mintáinak a vizsgálati eredményei

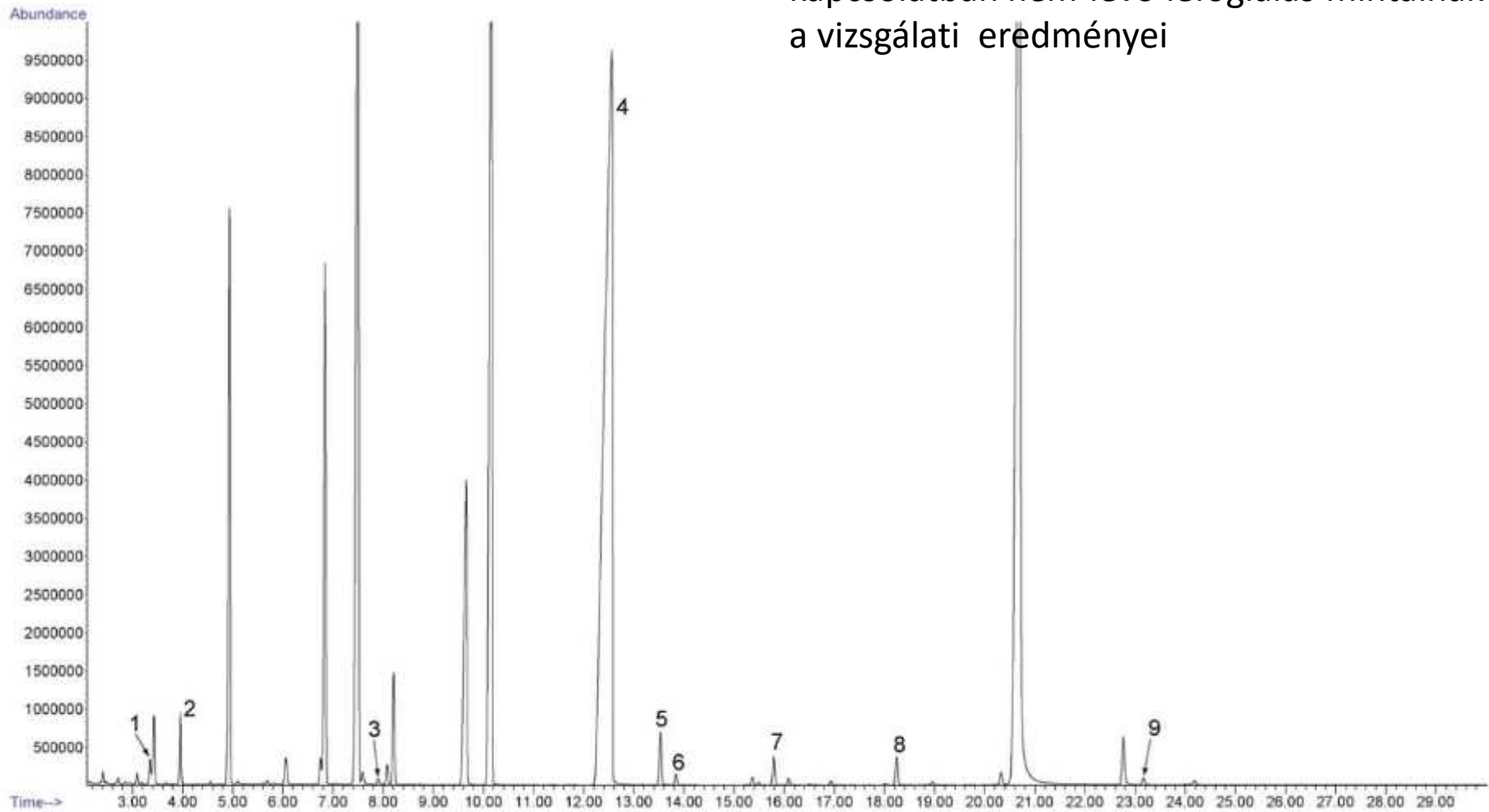


Fig. 2. Chromatogram of a typical cocaine samples. Numbers on the chromatogram refers to Table 2.

Kemometriai értékelés

Célirányosan alkalmazott matematikai, statisztikai és logikai lépések, melyekkel az „n” dimenziós analitikai eredményből megfelelően optimalizált módszerekkel a lehető legtöbb kémiai információ nyerhető ki.

- Az adatok előkészítése: normalizálás, standardizálás, logaritmizálás, $\sqrt{}$, $\sqrt[4]{}$ vagy ezek kombinációja
- A hasonlóságok, kapcsolatok matematikai megfogalmazása
- A különbségtétel bizonyítása (valós pozitív/fals pozitív, valós negatív/fals negatív kapcsolatok)

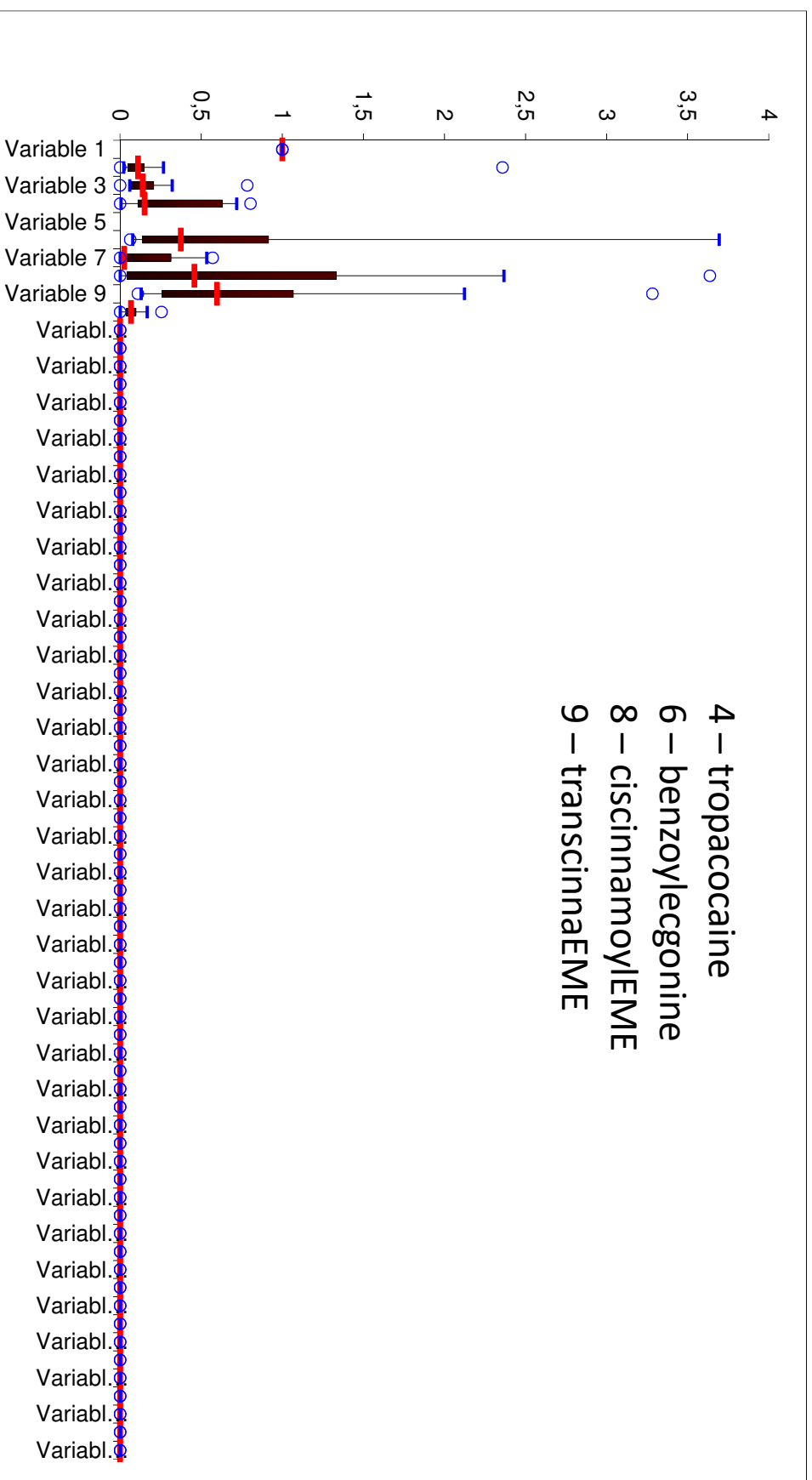
Kemometriai értékelés

Without pre-treatments (raw data)	-
Normalisation (N)	$N_j = \frac{x_{kj}}{\sum_{j=1}^p x_{kj}}$
Normalisation + square root (N + 2R)	$\sqrt[2]{N_j}$
Normalisation + fourth square root (N + 4R)	$\sqrt[4]{N_j}$
Similarity measurements	Formula
Modified square cosine (1)	$100 - \left(100 \times \left[\frac{(y_{k1}y_{l1} + y_{k2}y_{l2} + \dots + y_{kp}y_{lp})^2}{(y_{k1}^2 + y_{k2}^2 + \dots + y_{kp}^2)(y_{l1}^2 + y_{l2}^2 + \dots + y_{lp}^2)} \right] \right)$
Pearson (r_{kl}) (2)	$\frac{\sum_{j=1}^p [(y_{kj} - \bar{y}_k)(y_{lj} - \bar{y}_l)]}{\sqrt{\sum_{j=1}^p (y_{kj} - \bar{y}_k)^2 \sum_{j=1}^p (y_{lj} - \bar{y}_l)^2}}$
Modified Pearson (3)	$\left(\frac{1 - r_{kl}}{2} \right) \times 100$
Euclidean distance (4)	$\sqrt{\sum_{j=1}^p (y_{kj} - y_{lj})^2}$

Az adatok különböző módon történő előkészítése

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	Sample Name	heneicosano	ecgonineme	ecgonine	tropacocain	cocaine	benzoylecgr	norcocaine	ciscinnamoy	TranscinnaE	Trimethoxy
2	146_04_13_1a	0,06381415	0	0	0,02524468	0,46212704	0,03226949	0,04786408	0,0133196	0,03319923	0,01474869
3	146_04_13_2a	0,06734216	0	0	0,0259629	0,47615439	0,03140653	0,04920637	0,01346114	0,03467467	0,01516672
4	146_04_13_3a	0,06666126	0	0	0,02566485	0,475034	0,03781845	0,04976828	0,01426079	0,03396363	0,01522719
5	146_04_13_4a	0,06572747	0	0	0,02575723	0,46274711	0,02924202	0,04798664	0,01354636	0,03364199	0,01407408
6	146_04_13_5a	0,06515266	0	0	0,02588811	0,47294466	0,03102574	0,04922126	0,01319561	0,03433318	0,01585251
7	392_09_12_1a	0,05395793	0,02061834	0,02051046	0	0,55152835	0,1043808	0	0,06258375	0,04488009	0
8	392_09_12_2a	0,05079416	0,01817436	0,01990219	0	0,53868675	0,10582293	0	0,06014061	0,04176117	0
9	392_09_12_3a	0,05116123	0,01923746	0,018805	0	0,51117485	0,09446338	0	0,05819535	0,04054167	0
10	392_09_12_4a	0,05164425	0,0205927	0,02104359	0	0,54423548	0,09943229	0	0,06188724	0,04315022	0
11	393_09_12_1a	0,06007011	0,01274017	0,01587421	0,04871925	0,57947068	0,0346523	0,01582674	0,02741986	0,04309345	0,01425437
12	393_09_12_2a	0,05889523	0,01358377	0,01763344	0,04846535	0,57739274	0,04745123	0,01648362	0,02849243	0,04430055	0,01530533
13	393_09_12_3a	0,06154621	0,0152593	0,01620355	0,05023292	0,60283899	0,03767102	0,01850647	0,03022792	0,04719925	0,01532331
14	393_09_12_4a	0,05842477	0,01441175	0,01514868	0,04904966	0,58242558	0,03641104	0,01654958	0,02931647	0,04586913	0,01414051
15	393_09_12_5a	0,05747347	0,01285549	0,01528733	0,04819955	0,57088303	0,03702496	0,0163444	0,029316	0,04475277	0,01628721
16	393_09_12_6a	0,0571794	0,0135392	0,01422433	0,04871734	0,56968239	0,03508583	0,01623766	0,02829058	0,04467581	0,01537308
17	394_09_12_1a	0,06463592	0,02501438	0,02698483	0,02310648	0,57202311	0,03457982	0,01012736	0,05435794	0,06130843	0,02045245
18	394_09_12_2a	0,06471656	0,02365524	0,02588511	0,02382404	0,56356517	0,03410103	0,01043346	0,0534958	0,05982778	0,02017632
19	394_09_12_3a	0,06460675	0,02506783	0,02708377	0,02379071	0,58200125	0,03641384	0,01106193	0,05868112	0,06464227	0,02115309
20	394_09_12_4a	0,06464442	0,02440099	0,02770307	0,02427774	0,57094912	0,03350241	0,01060876	0,05777083	0,06336088	0,02042199
21	394_09_12_5a	0,06528029	0,02519793	0,02804053	0,02316844	0,58743165	0,03496705	0,01044096	0,05771844	0,06398222	0,02098987
22	396_09_12_1a	0,06886399	0,06374427	0,05939667	0,03554895	0,55854783	0,061157	0	0,01163041	0,02274577	0,01464189
23	396_09_12_2a	0,06808311	0,06488929	0,06028807	0,03659332	0,57145207	0,0627692	0	0,01079107	0,02327824	0,01395927
24	396_09_12_3a	0,06948501	0,06543359	0,06010498	0,03625961	0,57129367	0,06205472	0	0,01049453	0,02296961	0,01398234
25	396_09_12_4a	0,06526337	0,01440756	0,01951186	0,02323861	0,55075345	0,02433988	0,03538446	0,04476016	0,03803115	0,01318243
26	396_09_12_5a	0,06647134	0,01296978	0,01763785	0,0213478	0,54426722	0,02290288	0,03711284	0,04618684	0,03773374	0,01288762
27	396_09_12_6a	0,06601401	0,01633561	0,01947801	0,02268239	0,57382823	0,02462323	0,03955864	0,04406486	0,03777357	0,0138243
28	409_10_12_1_1a	0,05651479	0,08045709	0,0199357	0,03347964	0,54019717	0,01459215	0,00715834	0	0,04013007	0,0163371
29	409_10_12_1_3a	0,05410013	0,08308343	0,02290762	0,03345188	0,54923923	0,0171475	0,00768549	0	0,04093142	0,01658257
30	409_10_12_1_6a	0,06621536	0,01301155	0,01759658	0,00949787	0,56179092	0,05535207	0,00853575	0,05538958	0,05173426	0
31	409_10_12_1_9a	0,06399505	0,00941862	0,01918343	0,00898476	0,53707853	0,06195819	0	0,05225976	0,0489822	0
32	216_05_13_1a	0,06518298	0,03283318	0,01869644	0,02163487	0,60138042	0,01625208	0,03510072	0	0,02628038	0,017826
33	216_05_13_2a	0,06438237	0,03167469	0,01672252	0,02103395	0,61581026	0,01676868	0,03627697	0	0,02751769	0,01920957
34	216_05_13_3a	0,06587915	0,03297263	0,01756188	0,02199453	0,61123967	0,01690186	0,03573978	0	0,02818405	0,01883697
35	216_05_13_4a	0,06432561	0,03306083	0,01778482	0,02195279	0,61283894	0,01732856	0,03645773	0	0,02789116	0,01807233
36	216_05_13_5a	0,06401622	0,03323857	0,01744962	0,0221621	0,61489744	0,01701731	0,03594111	0	0,02721294	0,01912129
37	274_07_12_1a	0,06748526	0,02071061	0,03240165	0,05360537	0,74952856	0,0556753	0,04886805	0,07696396	0,07491917	0,03195708
38	274_07_12_2a	0,06583902	0,02072414	0,03236968	0,05318166	0,75336558	0,05522892	0,04920758	0,07727961	0,07575815	0,03301059
39	274_07_12_3a	0,06668769	0,01958011	0,03096253	0,05267292	0,73771822	0,05421534	0,04774213	0,07552552	0,07408776	0,03241139
40	274_07_12_4a	0,06562932	0,02075785	0,03224183	0,05324289	0,74690917	0,05426352	0,04812381	0,07664022	0,0745489	0,03314724
41	274_07_12_5a	0,06733347	0,02049237	0,03221643	0,0533226	0,74162075	0,05364977	0,04790056	0,07544124	0,0747267	0,03224778
42	413_10_12_1a	0,06586547	0,02195496	0,02573957	0,05729437	0,69580383	0,02040351	0	0,0163003	0,02333448	0,02537762
43	413_10_12_2a	0,06465104	0,02220104	0,02420444	0,05640206	0,66230256	0,02006286	0	0,01561628	0,02227226	0,02420444

Ki kell választani az informatív változókat



	A	B	C	D	E	F	G	
	Run Matrix Calculation		Threshold		99,00			Create your own Similarity Matrix
1								
2	Sample Name	Variable 1	Variable 2	Variable 3	Variable 4			
3	146_04_13_1a	0,1564969	0,25571147	0,043566092	0,27065865			
4	146_04_13_2a	0,14863886	0,21750323	0,039956692	0,26512497			
5	146_04_13_3a	0,14822809	0,32185501	0,045765676	0,25958584			
6	146_04_13_4a	0,15356936	0,19793417	0,042476728	0,26198076			
7	146_04_13_5a	0,15788333	0,22676712	0,041019913	0,27769229			
8	392_09_12_1a	0	3,74223162	1,345279887	0,69182583			
9	392_09_12_2a	0	4,34042215	1,401871055	0,67595481			
10	392_09_12_3a	0	3,40914188	1,293882006	0,62794473			
11	392_09_12_4a	0	3,70690025	1,436012332	0,69810698			
12	393_09_12_1a	0,65730564	0,00032343	0,00000000	0,00000000			
13	393_09_12_2a	0,67	Stat					
14	393_09_12_3a	0,66						
15	393_09_12_4a	0,70						
16	393_09_12_5a	0,70						
17	393_09_12_6a	0,72						
18	394_09_12_1a	0,12						
19	394_09_12_2a	0,13						
20	394_09_12_3a	0,1						
21	394_09_12_4a	0,14						
22	394_09_12_5a	0,1						
23	396_09_12_1a	0,26						
24	396_09_12_2a	0,28						
25	396_09_12_3a	0,27						
26	396_09_12_4a	0,12						
27	396_09_12_5a	0,10						
28	396_09_12_6a	0,11						
29	409_10_12_1_1a	0,35						
30	409_10_12_1_3a	0,38						
31	409_10_12_1_6a	0,02						
32	409_10_12_1_9a	0,015						
33	216_05_13_1a	0,11016409	0,0621655	0	0,16255288			
34	216_05_13_2a	0,10673521	0,06783654	0	0,18267953			
35	216_05_13_3a	0,11146367	0,06582232	0	0,18302518			
36	216_05_13_4a	0,11646934	0,07256995	0	0,18800322			
37	216_05_13_5a	0,119851	0,07066457	0	0,18070538			
38	274_07_17_1a	0,63095538	0,68062386	1,300639474	1,23244638			

X

Select a similarity function

Pearson
 Euclidian distance

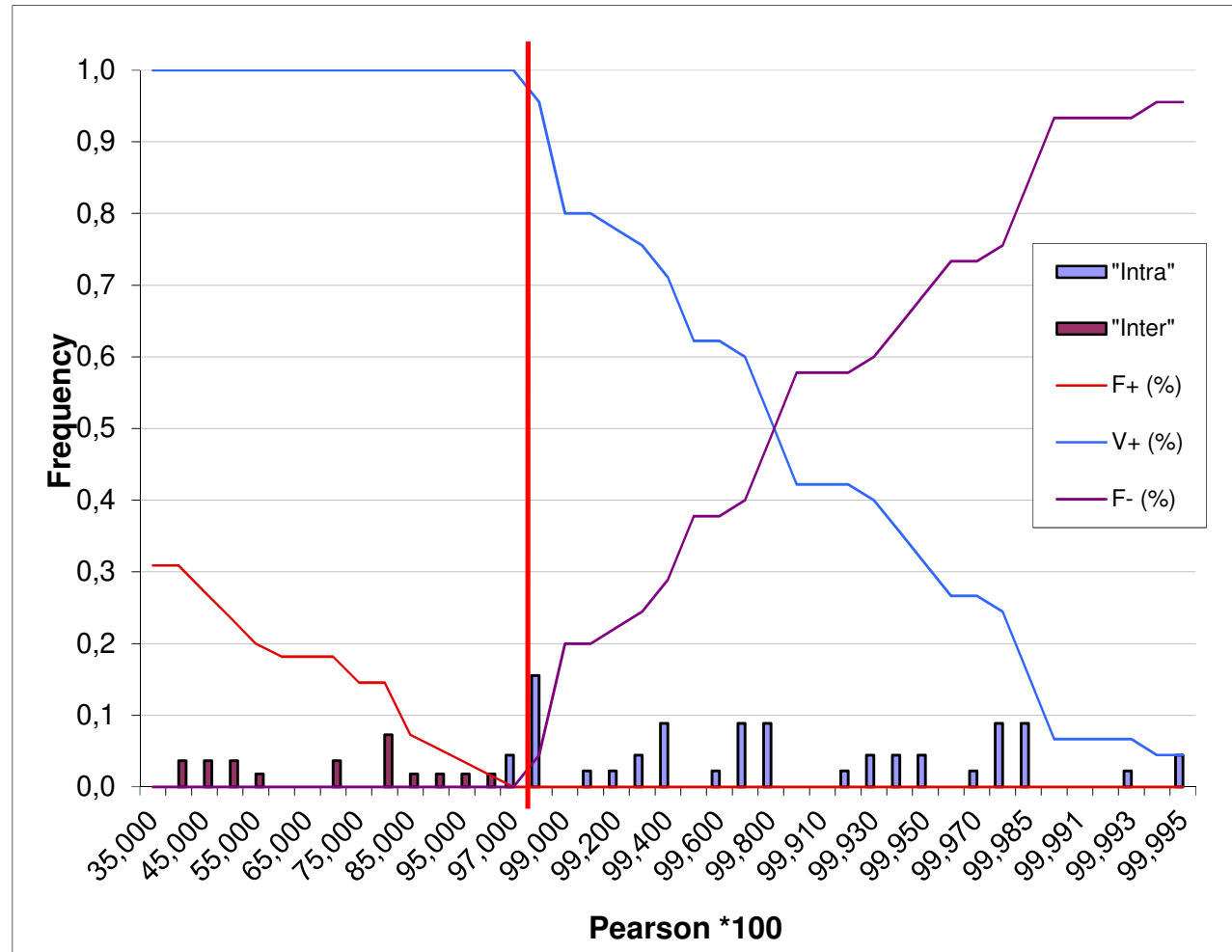
Enter the number of variable

Choose your threshold

A threshold (küszöbérték) megadása a célnak megfelelően (pl. a bíróságnak)

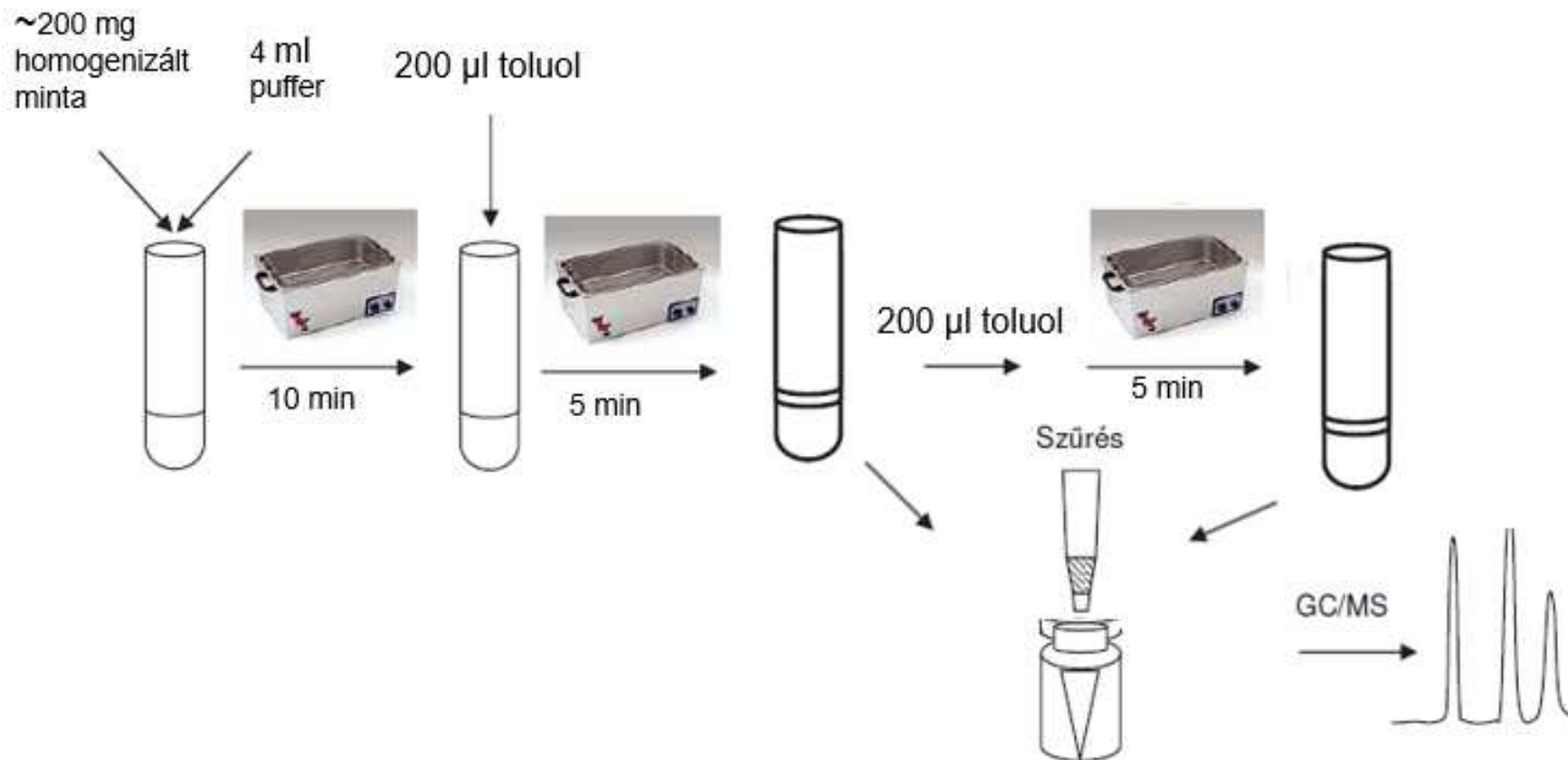
A lehető legkisebb fals pozitív és fals negatív egyezéseket adja a kapcsolati mátrix

	A	B	C
1			
2	Number of values		
3	Intra	Inter	
4	45	309	
5			
6	Values		
7	Intra	Inter	
8	98,4467062	98,9570722	
9	98,0663897	95,9719515	
10	97,7519524	97,0757719	
11	97,7003258	98,850969	
12	98,4176313	29,8781963	
13	98,2894053	31,2579242	
14	99,7823976	27,8266973	
15	99,4048296	27,3481428	
16	98,6165207	40,39649	
17	99,9790146	76,5268666	
18	99,934366	49,0423029	
19	99,9255607	47,7280863	
20	99,9990454	50,0122877	
21	99,9878996	43,9266981	
22	99,3781603	0,43009261	
23	99,7732506	-0,9853683	
24	99,9870853	-3,5620596	
25	99,9869904	-6,6357818	
26	99,9831902	-3,4210651	
27	99,9814029	53,4387523	
28	99,9840746	53,7907507	
29	99,1301697	53,7865423	
30	99,614452	-52,707987	
31	99,944986	-55,717623	
32	99,9996815	-50,616487	
33	99,941158	54,7853758	
34	99,9584561	59,175234	



Amfetamin

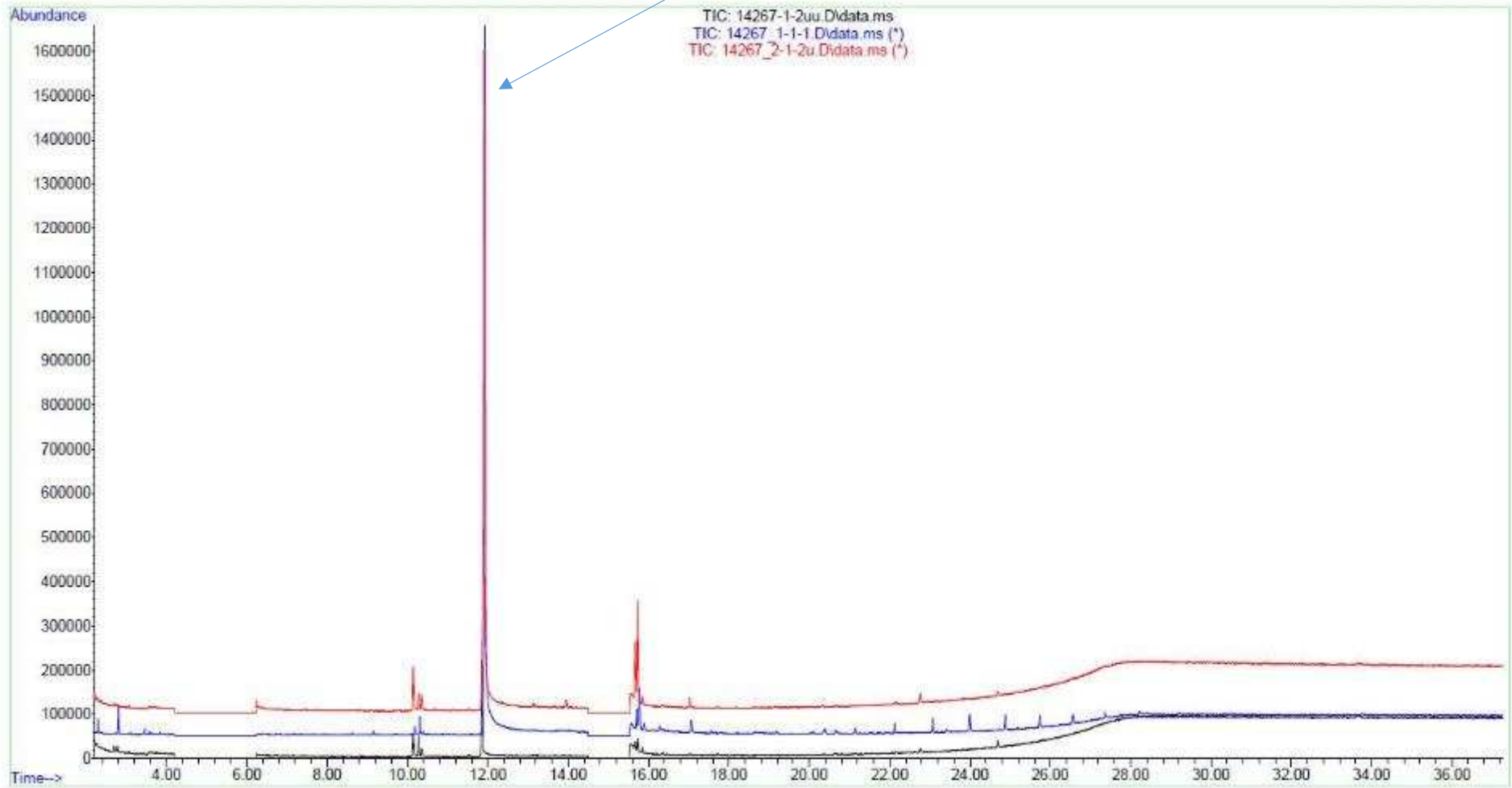
Standard Operating Procedures for the European Harmonised Method for the Profiling of Amphetamine (EHMPA)



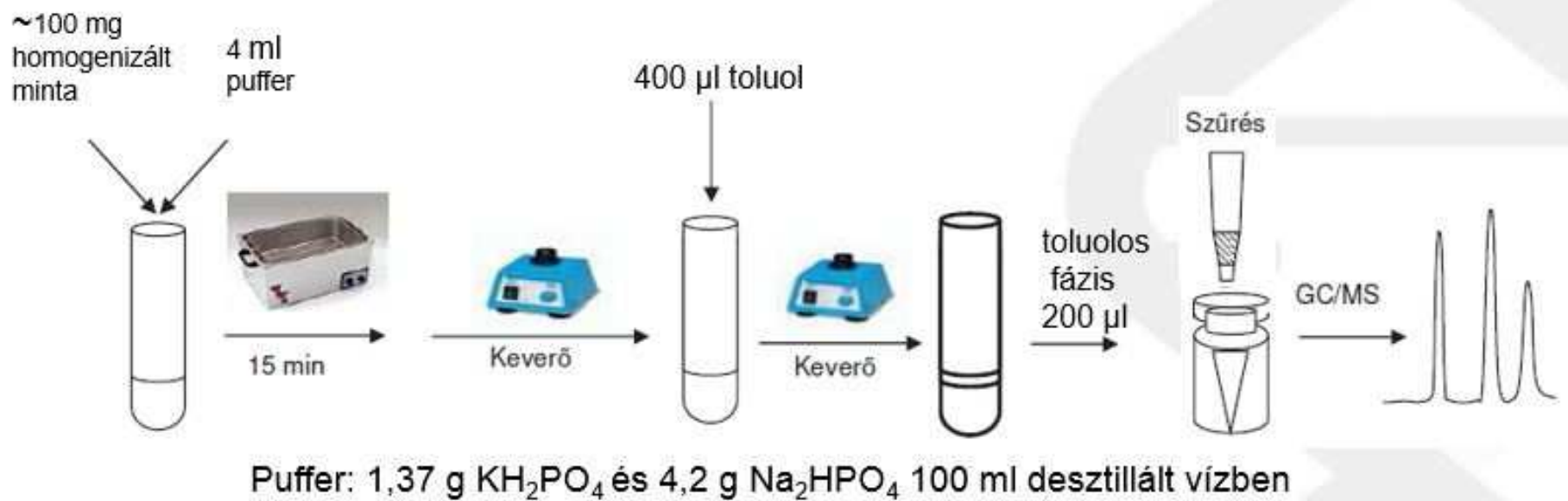
Puffer: 13,61 g KH_2PO_4 100 ml deszt. vízben + 3,70 g NaOH 92,2 ml deszt. vízben

Amfetamin

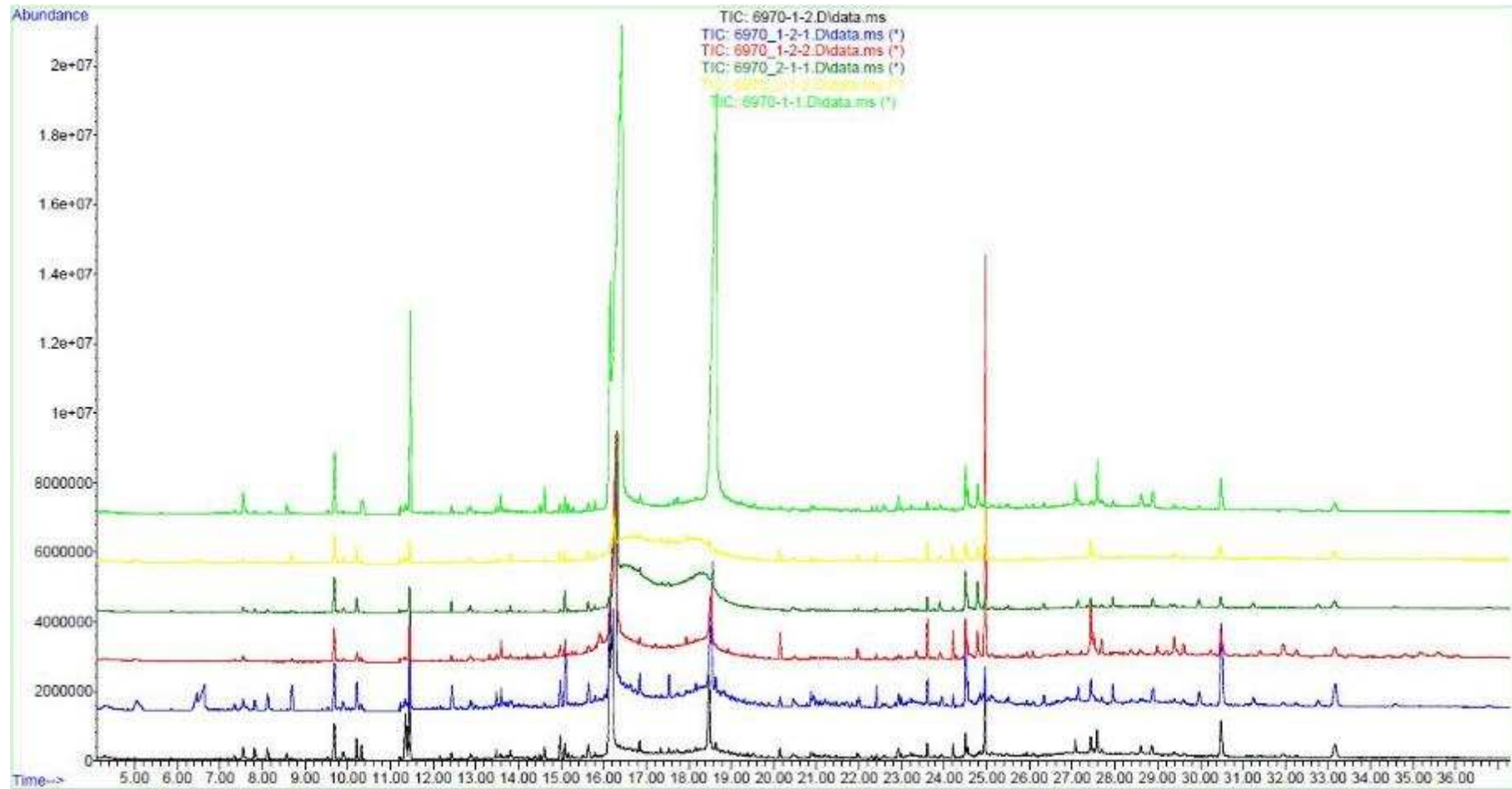
Szennyezésként ibuprofén van jelen mindegyik mintában



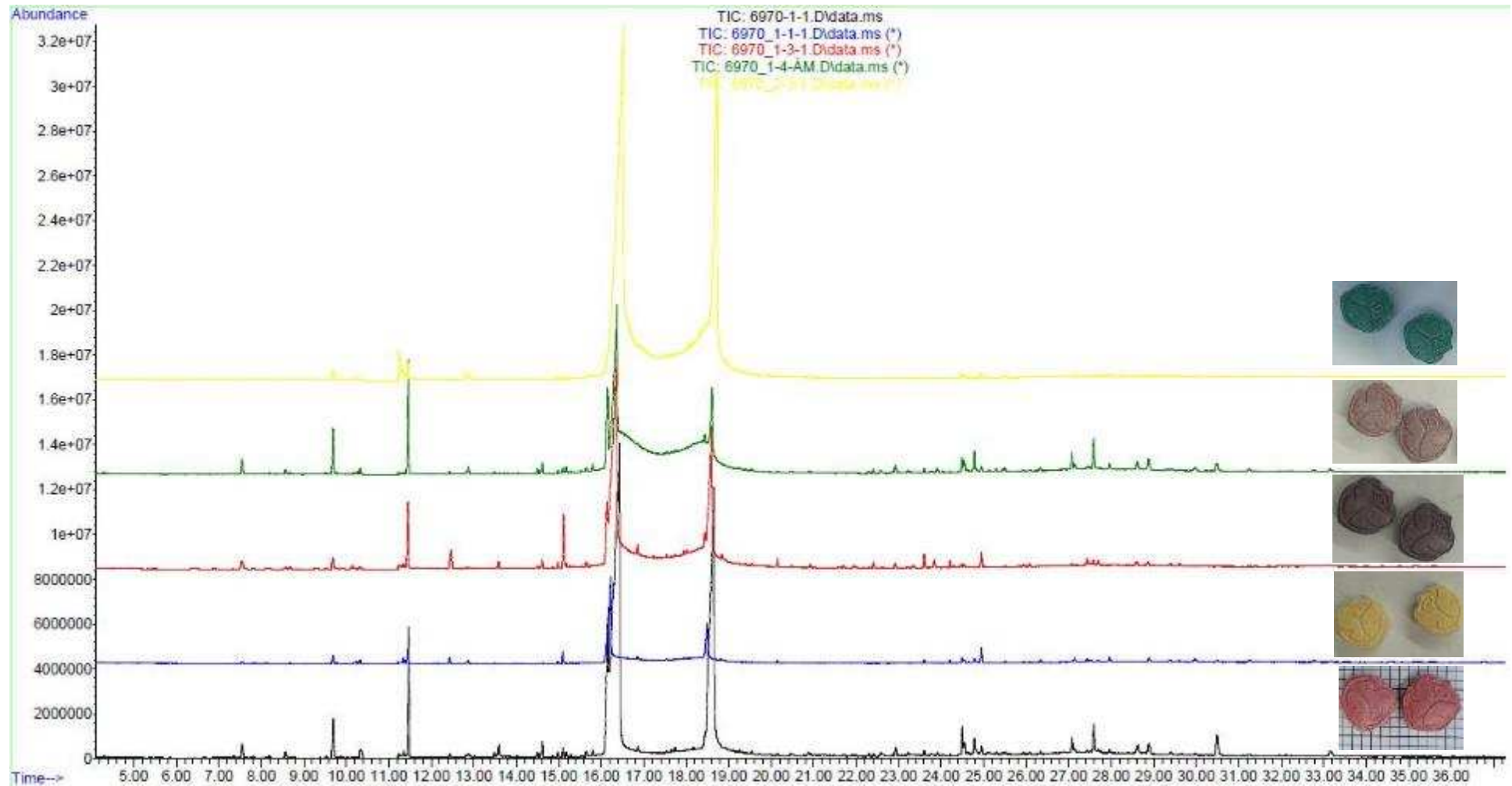
MDMA



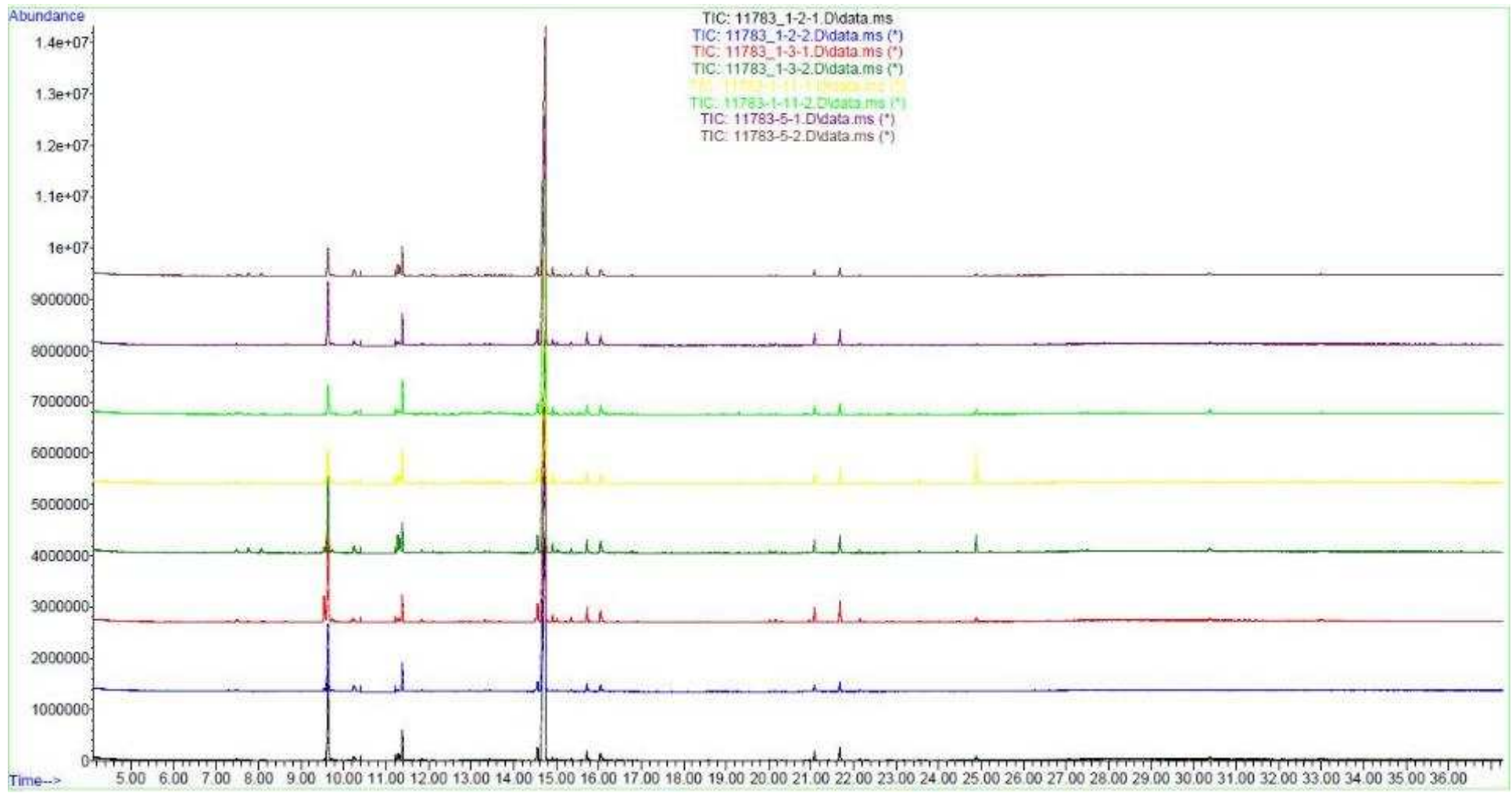
MDMA azonos színű tabletták nyomszennyezői



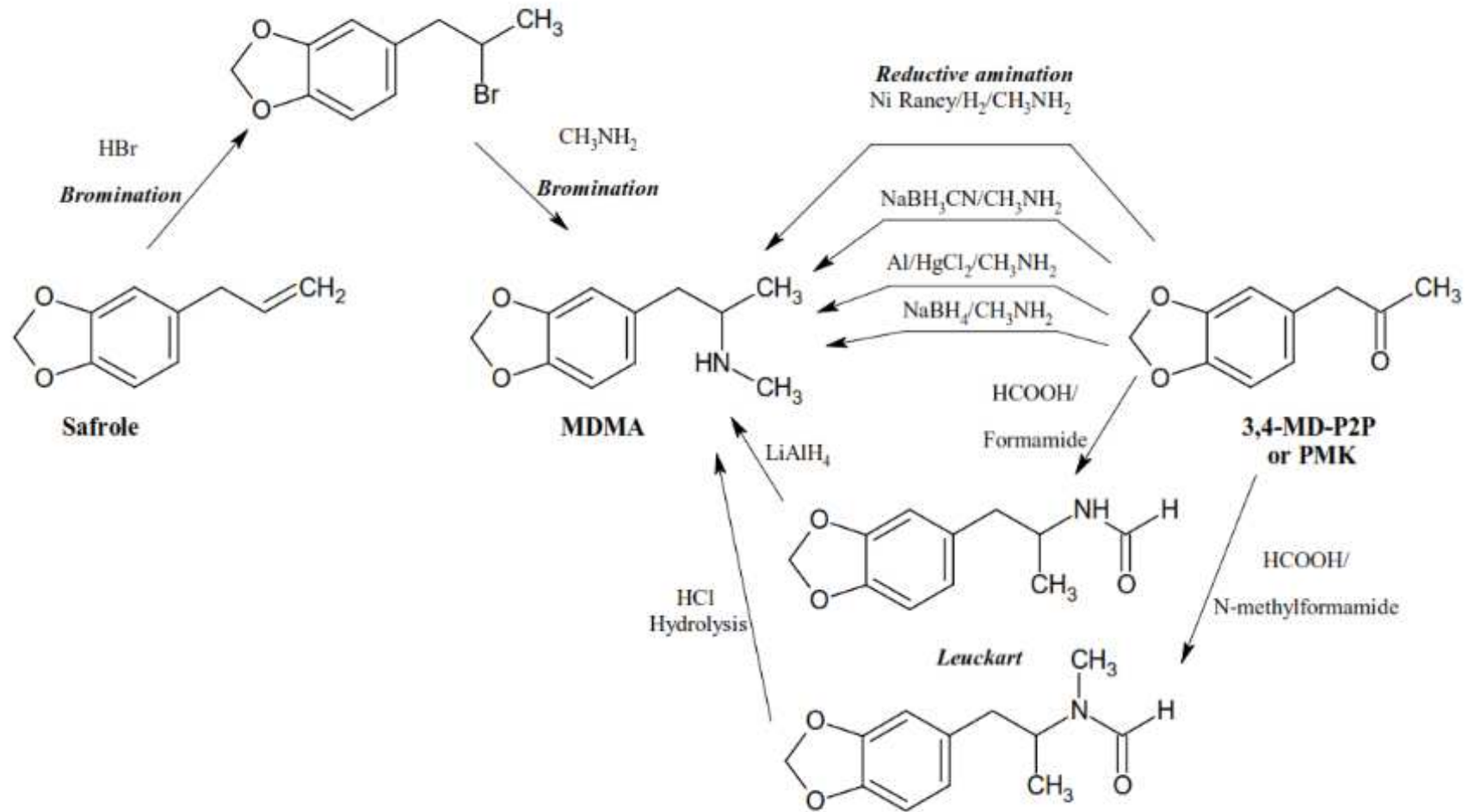
MDMA különböző színű tabletták nyomszennyezői



MDMA azonos színű és lenyomatú tabletták nyomszennyezői

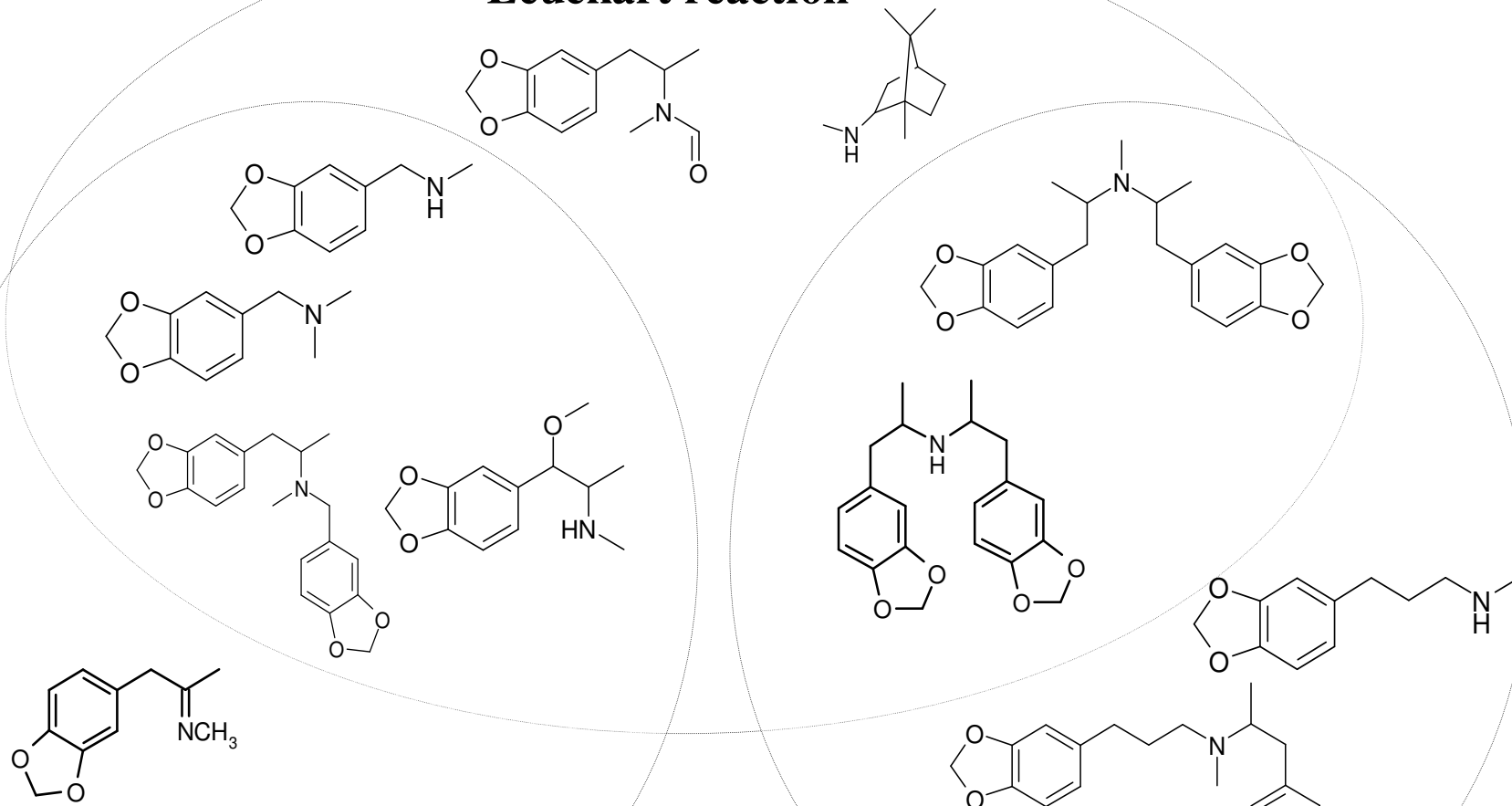


MDMA nyomszennyezők



MDMA nyomszennyezők alapján

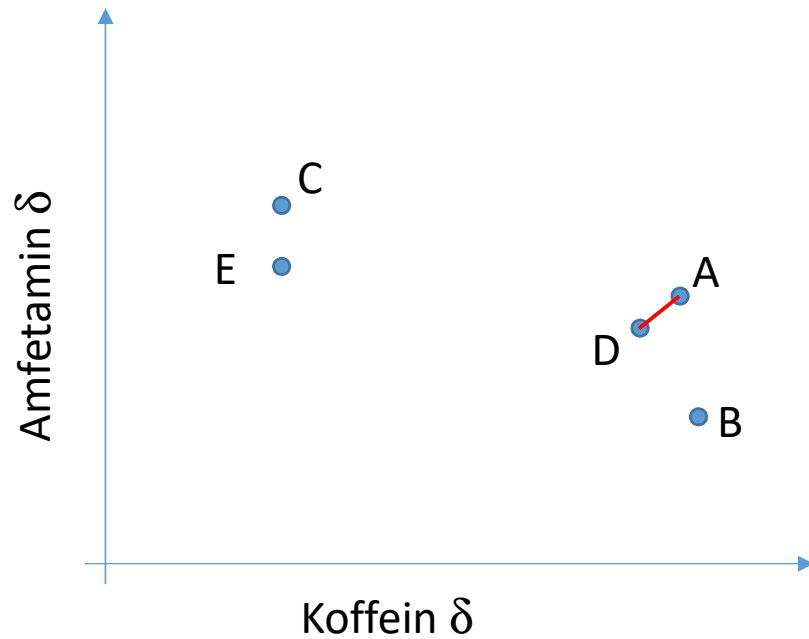
Leuckart reaction



Reductive amination

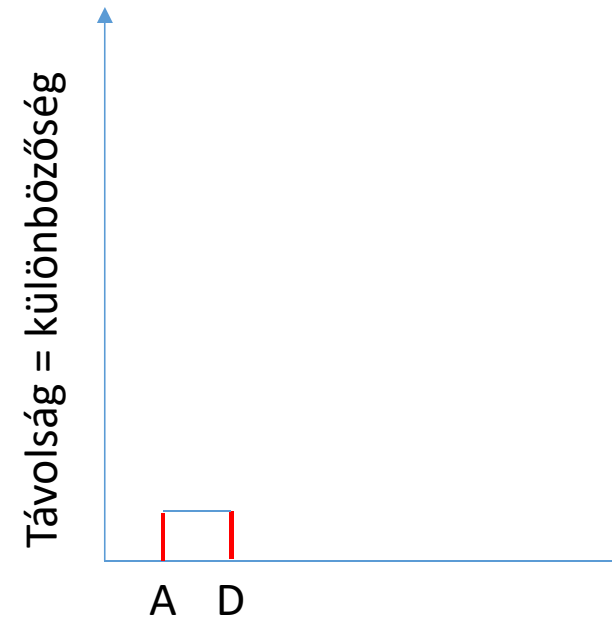
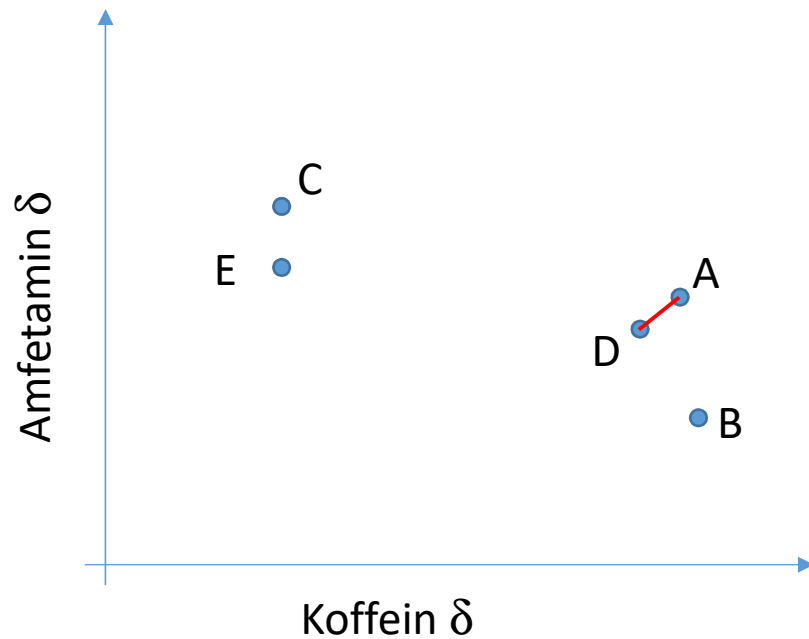
Safrole bromination

Dendrogram készítése



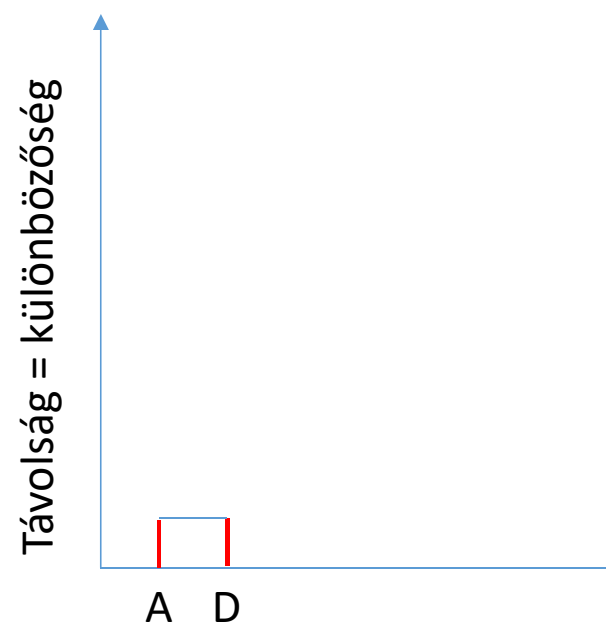
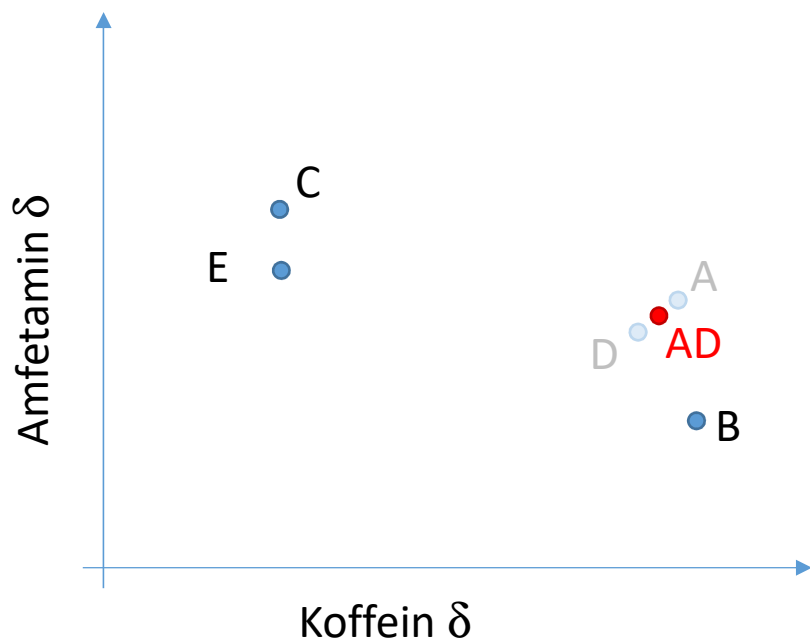
1. Keressük ki a legközelebbi párt
2. Rajzoljuk fel a távolságuknak megfelelő kapcsolatot
3. Helyettesítsük őket az átlagukkal
4. Kezdjük az elejétől

Dendrogram készítése



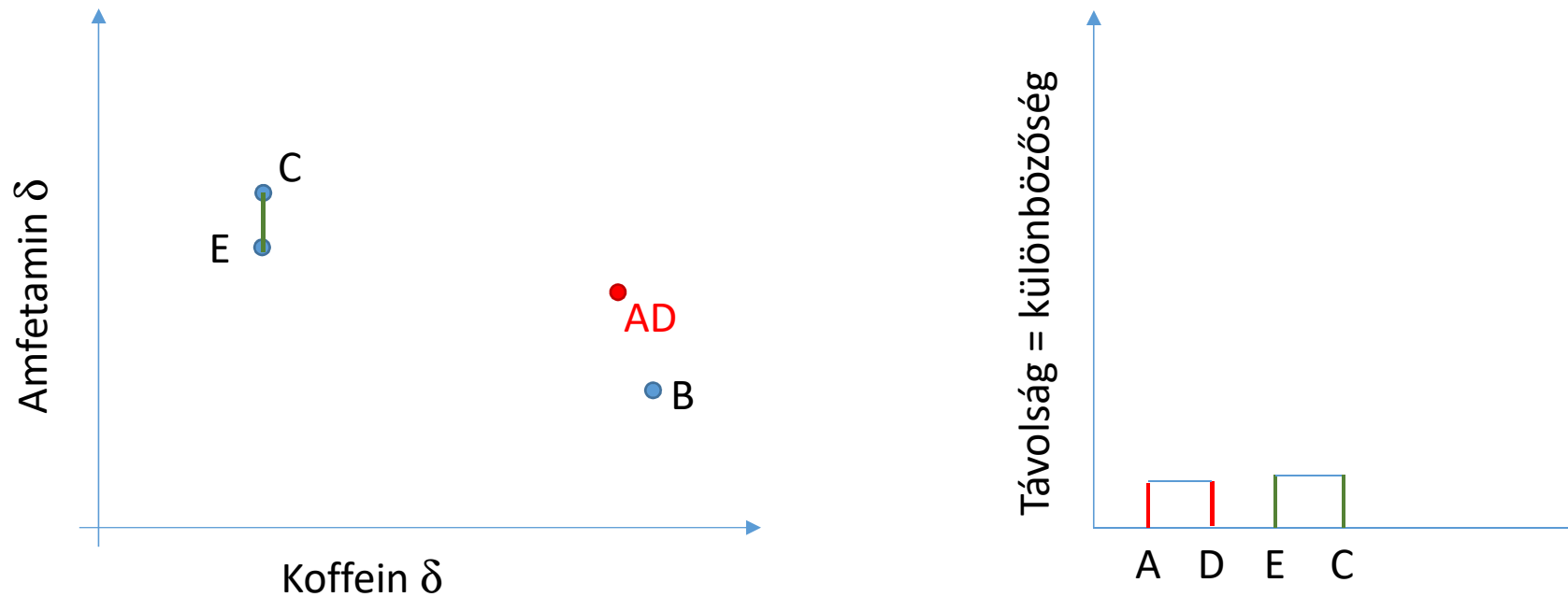
1. Keressük ki a legközelebbi párt
2. Rajzoljuk fel a távolságuknak megfelelő kapcsolatot
3. Helyettesítsük őket az átlagukkal
4. Kezdjük az elejétől

Dendrogram készítése



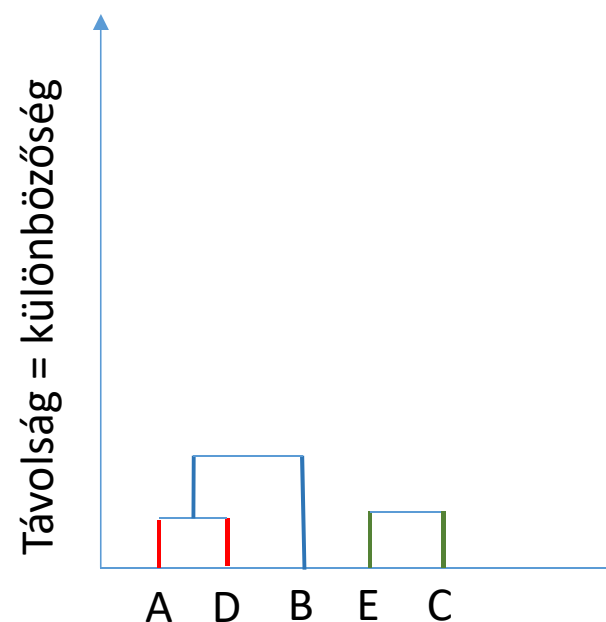
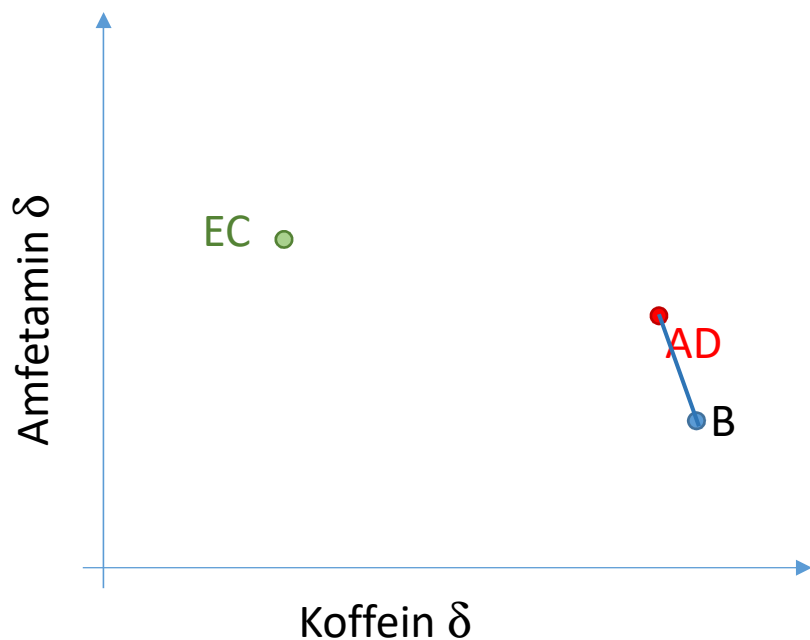
1. Keressük ki a legközelebbi párt
2. Rajzoljuk fel a távolságuknak megfelelő kapcsolatot
3. Helyettesítsük őket az átlagukkal
4. Kezdjük az elejétől

Dendrogram készítése



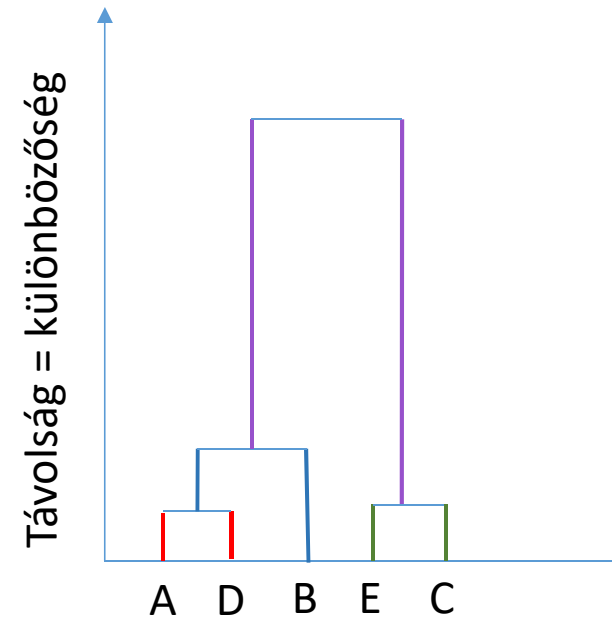
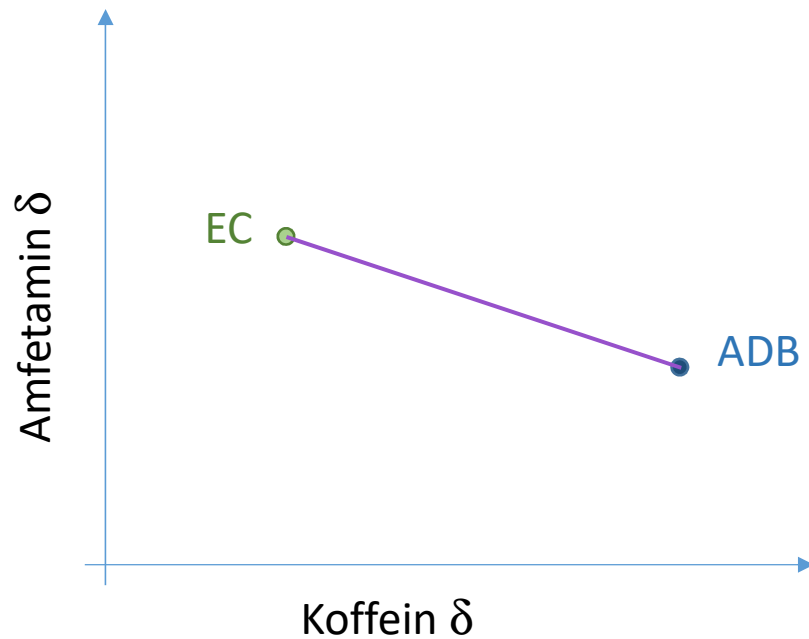
1. Keressük ki a legközelebbi párt
2. Rajzoljuk fel a távolságuknak megfelelő kapcsolatot
3. Helyettesítsük őket az átlagukkal
4. Kezdjük az elejétől

Dendrogram készítése



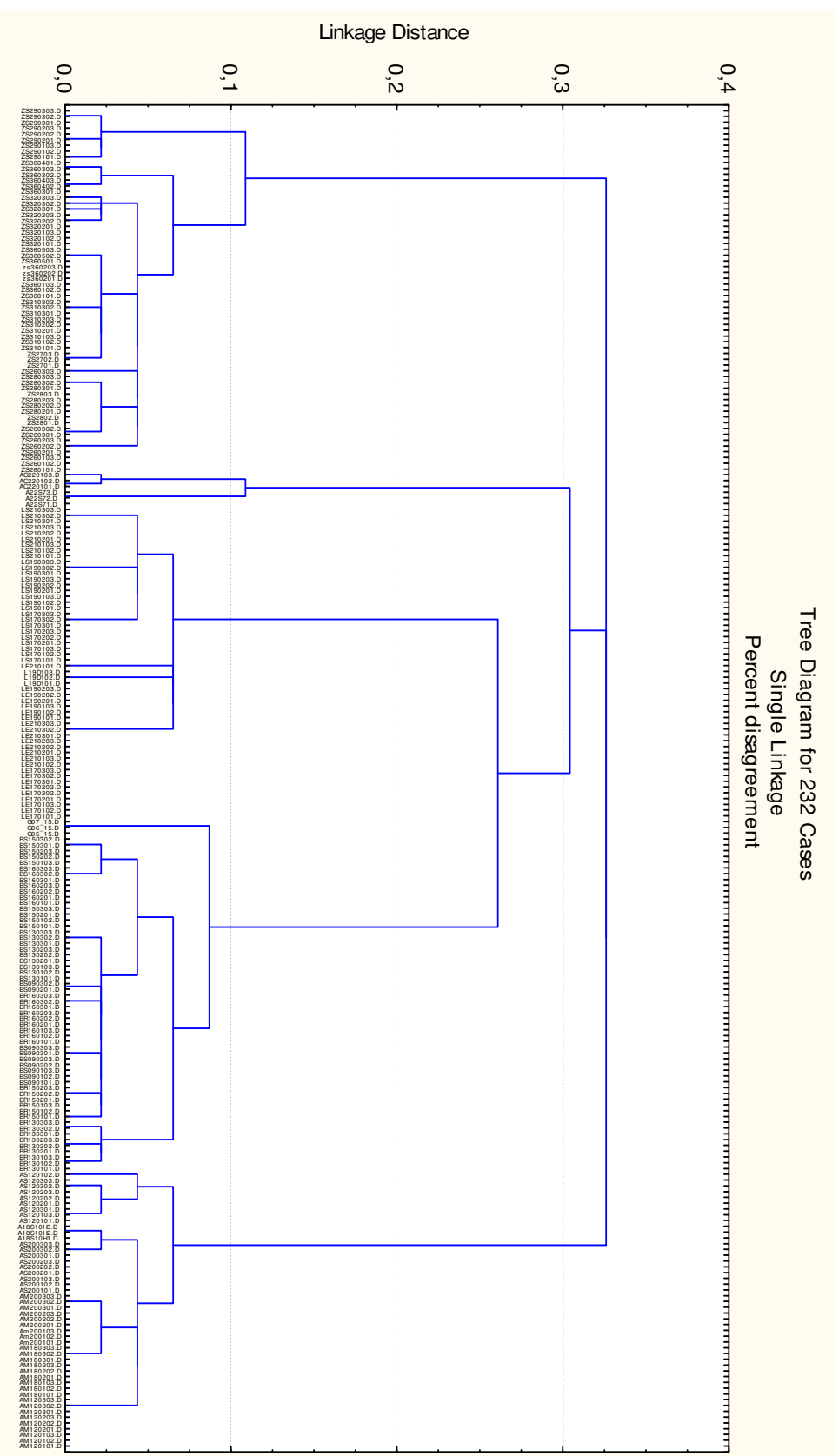
1. Keressük ki a legközelebbi párt
2. Rajzoljuk fel a távolságuknak megfelelő kapcsolatot
3. Helyettesítsük őket az átlagukkal
4. Kezdjük az elejétől

Dendrogram készítése

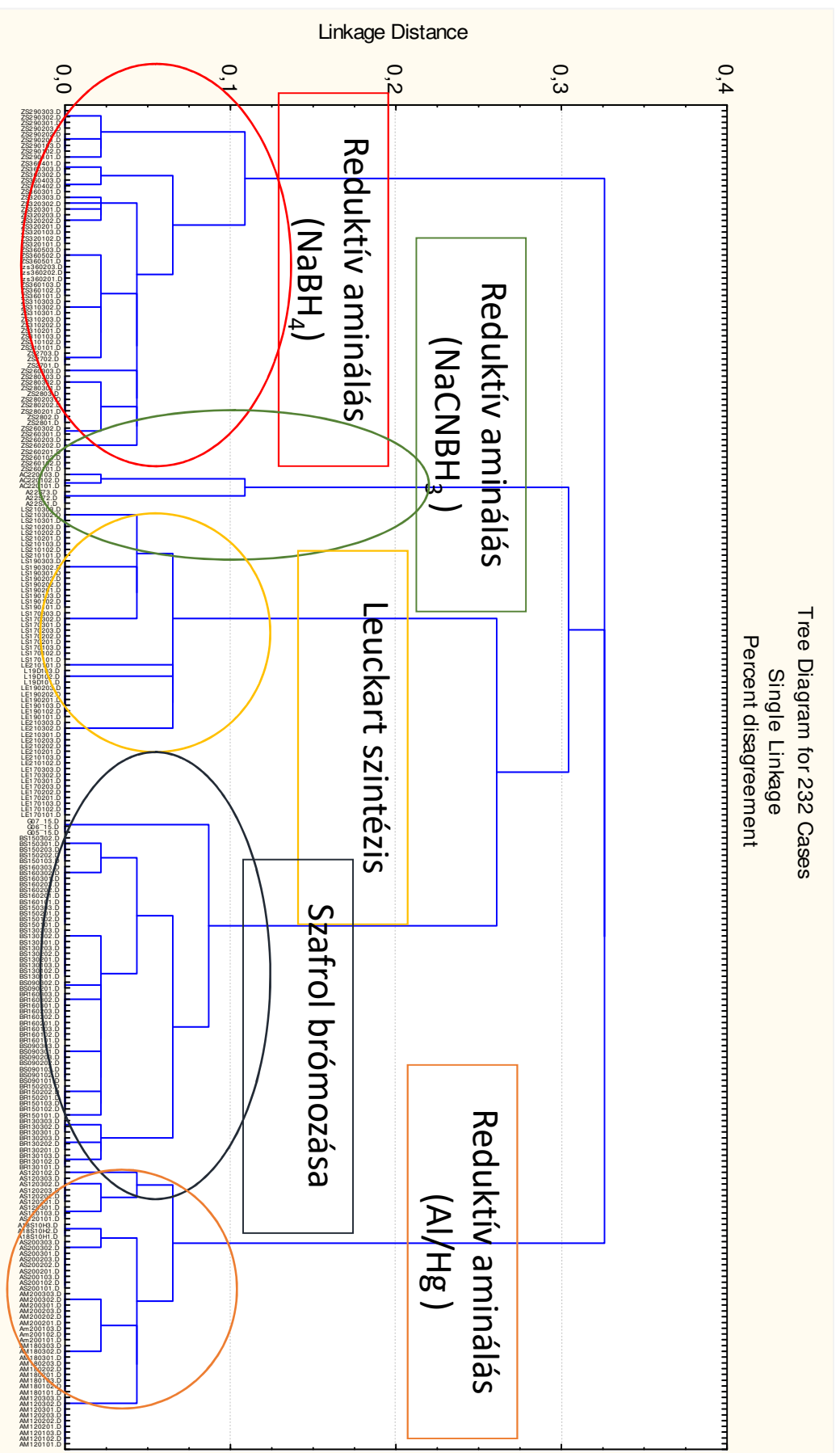


1. Keressük ki a legközelebbi párt
2. Rajzoljuk fel a távolságuknak megfelelő kapcsolatot
3. Helyettesítsük őket az átlagukkal
4. Kezdjük az elejétől

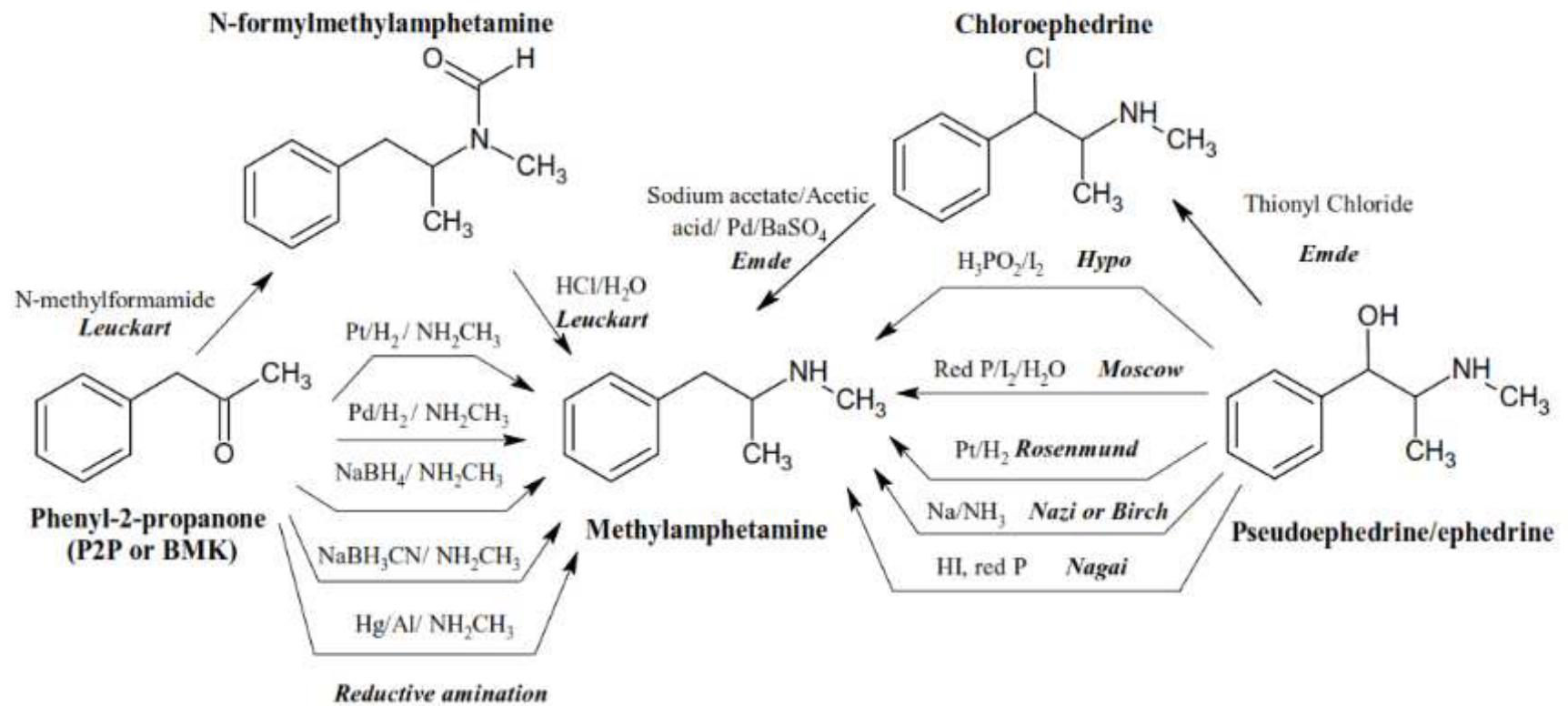
Klaszterdiagram (dendrogram)



Klaszterdiagram



Metamfetamin



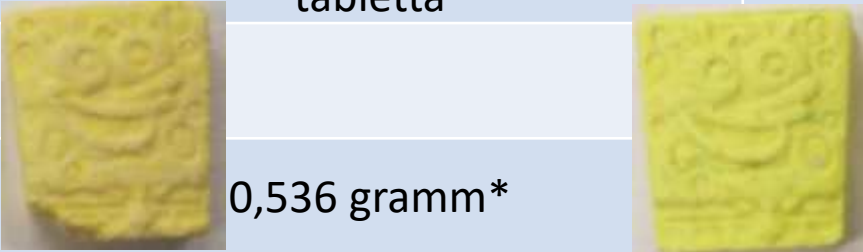
Metamfetamin

Table 1-2: List of impurities detected in MA

Compound name	Origin	Compound name	Origin
cis-1,2-dimethyl-3-phenylaziridine	By-product (Nagai, Emde routes)	1-phenyl-2-propanol	Intermediate (reductive amination route)
amphetamine	Contaminant or by-product (reductive amination route)	benzyl methyl ketone (1-phenyl-2-propanone, BMK or P2P)	Precursor (Leuckart and reductive amination routes); by-product (Nagai, Emde routes)
trans-1,2-dimethyl-3-phenylaziridine	By-product (Nagai, Emde routes)	N,N-dimethylamphetamine	By-product (Leuckart and reductive amination routes)
1-phenylpropan-2-one oxime (1)	By-product	1-phenylpropan-2-one oxime (2)	By-product
ephedrine	Precursor (ephedrine routes)	pseudoephedrine	Precursor (ephedrine routes)
1-phenyl-2-nitropropene	By-product (Leuckart, reductive amination routes)	N-acetylamphetamine	Contamination (Leuckart and Emde routes)
N-formylamphetamine	Contamination (Leuckart route)	N-formylmethyamphetamine	Intermediate product (Leuckart, Nagai route)
N-acetylmethamphetamine	By-product (Nagai route)	N-benzylmethamphetamine	By-product
N-methyl-2-(1,3-diphenyl)propylamine		1-(1',4'-cyclohexadienyl)-2-methylaminopropane (CMP)	By-product (Birch route)

M. Morelato: Forensic Drug Profiling: a tool for intelligence-led policing, PhD thesis, University of Technology, Sydney 2015

Az eredmények interpretálása

Bűnjel jele	01.		02.	
A vizsgálat tárgya	neonsárga színű, Spongya Bob alakú, Spongya Bob elnevezésű, egyik oldalán Spongya Bob lenyomatú tabletta		citromsárga színű, Spongya Bob alakú, Spongya Bob elnevezésű, egyik oldalán Spongya Bob lenyomatú tabletta	
Fénykép a tablettákról				
1 db tabletta átlagtömege	0,536 gramm*		0,550 gramm	
Tabletták paraméterei	szélesség	~ 9,95 mm	szélesség	~ 9,98 mm
	hosszúság	~ 12,13 mm	hosszúság	~ 12,12 mm
	vastagság	~ 4,47 mm	vastagság	~ 4,60 mm
Bűnjel hatóanyagtartalma [tömeg%]	25,2 ± 1,5		25,1 ± 1,8	
1 db tablettában az átlagos hatóanyagtartalom	135,1 milligramm/tabletta*		138,1 milligramm/tabletta	

*: hiányos tabletta

Az eredmények interpretálása

- Az infravörös spektroszkópiai vizsgálatok alapján, mindhárom por esetében az amfetamin **amfetamin-szulfát** só formájában van jelen. Az amfetamin mellett adalékanyagként **koffein** azonosítható, a porok nem tartalmaznak azonosítható mennyiségben egyéb, a feketepiaci amfetamin készítmények esetében gyakran alkalmazott hígító anyagokat (például laktóz, kreatin).
- A gázkromatográfia-tömegspektrometriás vizsgálatok alapján mindhárom mintában az amfetamin és a koffein mellett kis mennyiségben **DPIA** {N,N-di-(β-fenil-izopropil)-amin} azonosítható, amely az amfetamin előállítására leggyakrabban használt, úgynevezett **Leuckart** reakció során keletkező jellegzetes melléktermék.
- A nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiai vizsgálatok alapján
 - Az XY-től lefoglalt, 1.1. jelű anyag $17,4 \pm 1,4$ % amfetamin-bázist,
 - a ZW-től lefoglalt, 1.2. jelű anyag $17,4 \pm 1,3$ % amfetamin-bázist,
 - a PR-től lefoglalt, 2. jelű anyag $18,0 \pm 1,4$ % amfetamin-bázist tartalmaz.A három anyag **amfetamin-bázis koncentrációja nem különbözik a mérés ismételhetségénél nagyobb mértékben.**

Az eredmények interpretálása

gyanúsított	XY	WZ
a lefoglalás helye	gépjármű	pince
csomagolás	simítózáras műanyag tasak	dupla műanyag tasakon belül „eperlevél” feliratú tasakban
mennyiség (gramm)	147,96 gramm	112,0 gramm
megjelenés	növényi törmelék	növényi törmelék
kimutatott komponensek (GC-MS, FTIR)	5F-MDMB-PINACA	5F-MDMB-PINACA
hatóanyag tartalom (tömegszázalék) (HPLC)	2,93 ± 0,23 %	3,08 ± 0,33%
δ, szénizotóp arány (ezrelék) (GC-IRMS)	- 26,38 ‰	- 26,465 ‰

Az eredmények interpretálása

Az XY-tól és a Z-től lefoglalt növényi anyagok (herbál vagy biofű néven is ismert) feketepiaci készítmények, amelyek előállításuk során növényi törmelék, mint hordozó anyagot impregnálnak a pszichoaktív hatóanyaggal.

A kérdéses bűnjeleket az Intézet biológus szakértője is megvizsgálta. Az a., b. és c. jelű növényi anyagok a *Malvaceae* családba tartozó növény levél-, virág-, illetve termésdarabjaiból állnak. A növényi anyag forrása orvosi ziliz (*Althaeaofficinalis*) lehetett.

Bizonyító erő

A kapott analitikai kémiai eredmények alapján *nem zárható ki*, hogy a porok ugyanazon tételből származó kokain, különböző adalék- és hígító anyagokkal végzett, különböző mértékű hígításával készültek.

A *dimetil-szulfon* ($(\text{CH}_3)_2\text{SO}_2$, metil-szulfonil-metán, DMSO_2) főként táplálék-kiegészítőként forgalmazzák, de a kábítószeres - leginkább a metamfetamin – hígító anyagaként is egyre gyakrabban előfordul.

A *koffein* élénkítő hatású vegyület - élelmiszer- és gyógyszeripari felhasználása mellett - a kábítószeresnél általánosan alkalmazott adalékanyag.

Megválaszolható kérdések?

- A lombikban lévő anyagmaradvány a lefoglalt porból származik?
- Készülhetett-e ugyanazon a gépen a kerek, kék színű Facebook elnevezésű tablettá és a lepke alakú, rózsaszín Tomorrowland-es tablettá?
- A bőröndből lefoglalt marihuána származhat a három évvel ezelőtt vizsgált marihuána mintából?

Összefoglalás

Profiling: illegális kábítószeres profilírozásán (karakterizálásán) a lefoglalt anyagok kémiai jellemzőinek a szisztematikus kinyerését és elemzését értjük abból a célból, hogy információt nyerhessünk azok előállítási és terjesztési módjáról, valamint hogy képet alkothassunk ezen anyagok illegális piacának a működéséről és változásairól.

Összehasonlítás: Adatbázis hiányában a rendelkezésre álló releváns analitikai technikák alkalmazásával a közös eredet valószínűsítése vagy kizárása különböző személytől, eltérő helyen vagy időben lefoglalt kábítószeres esetében.

Profilingnál nincs értelme több módszer használatának, összehasonlításnál azonban az ésszerű, elérhető vizsgálatok elvégzése indokolt.

Köszönöm a figyelmet!

rompos.eva@nszkk.gov.hu