

Zastosowanie metody dyfrakcji rentgenowskiej XRD do badań narkotyków syntetycznych

Wstęp i cel pracy

Dyfrakcja rentgenowska XRD jest obecnie bardzo popularną na świecie metodą analityczną używaną w kryminalistyce [1]. Wykorzystują ją laboratoria kryminalistyczne w takich krajach jak Stany Zjednoczone, Niemcy, Wielka Brytania, Holandia, Ukraina, Rosja, Japonia, Australia, Czechy, a także Polska. W Centralnym Laboratorium Kryminalistycznym Komendy Głównej Policji, jako jedynym w kraju spośród policyjnych laboratoriów kryminalistycznych, istnieje pracownia dyfrakcji rentgenowskiej.

Celem niniejszej pracy jest podkreślenie znaczenia metody dyfrakcji rentgenowskiej w badaniach narkotyków. Metoda ta bowiem nie została wymieniona wśród metod analizy narkotyków opisanych we wcześniejszych opracowaniach [2, 3], a zdaniem autora powinna zaistnieć w tzw. kategorii A, do której należy m.in. metoda spektrometrii w podczerwieni (IR).

Metoda dyfrakcji rentgenowskiej ma w kryminalistyce bardzo szerokie zastosowanie [1, 4]. Można ją wykorzystywać między innymi do analiz:

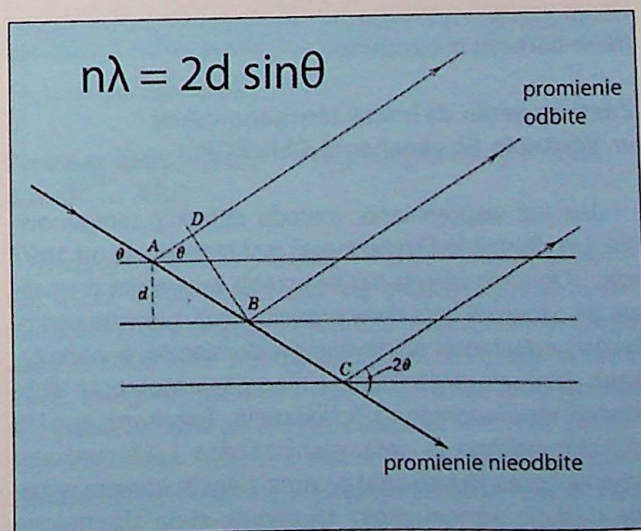
- substancji krystalicznych występujących w glebach, gdzie XRD stosuje się do analizy składu mineralnego, głównie zawartości glinokrzemianów;
- materiałów wybuchowych oraz resztek powstałych po wybuchu – do określenia fazy organicznej i nieorganicznej;
- farb i pigmentów przy kompleksowych analizach dzieł sztuki (obrazów i rzeźb), lakierów samochodowych i innych typów lakierów;
- materiałów budowlanych takich jak cementy, cegły, zaprawy murarskie – do ich identyfikacji i zbadania składu mineralnego;
- metali i stopów, przy identyfikacji oszustw, np. fałszerstw monet;
- substancji niezidentyfikowanych, np. proszków nieznanego pochodzenia celem ich identyfikacji i wyeliminowania potencjalnego ryzyka związanego z ich działaniem;
- narkotyków (analiza jakościowa).

Wydział Fizykochemii Centralnego Laboratorium Kryminalistycznego Komendy Głównej Policji wprowadził na początku 1997 roku analizę substancji krystalicznych metodą dyfrakcji rentgenowskiej (XRD) [5] jako rutynową analizę jakościową.

Dyfrakcja rentgenowska – podstawy, uwarunkowania

Warunkiem koniecznym zastosowania dyfrakcji rentgenowskiej do badań substancji jest krystaliczność badanego materiału. Oznacza to, że tylko substancja posiadająca budowę krystaliczną daje zadowalające wyniki analiz. Substancje amorficzne (niekrystaliczne) nie nadają się do tego typu analiz.

Każda substancja krystaliczna jest zbudowana z nieskończonej ilości powtarzających się pojedynczych komórek zwanych elementarnymi o odpowiedniej symetrii. Identyfikacja substancji krystalicznej metodą XRD polega na określeniu odległości międzypłaszczyznowych d_{hkl} badanych kryształów oraz intensywności ugiętego od tych płaszczyzn promieniowania rentgenowskiego i porównaniu ich z wartościami zawartymi w bibliotece. Biblioteka ta została opracowana przez International Centre for Diffraction Data (ICDD), międzynarodową instytucję zajmującą się tworzeniem baz danych do celów dyfrakcji rentgenowskiej. Baza danych dostępna w CLK KGP, zwana bazą PDF-2, zawiera około 100 000 substancji krystalicznych pomocnych do identyfikacji badanego materiału. Zasadę metody opisano szczegółowo w artykule pt. „Zastosowanie rentgenowskiej analizy fazowej w badaniach kryminalistycznych” [6].



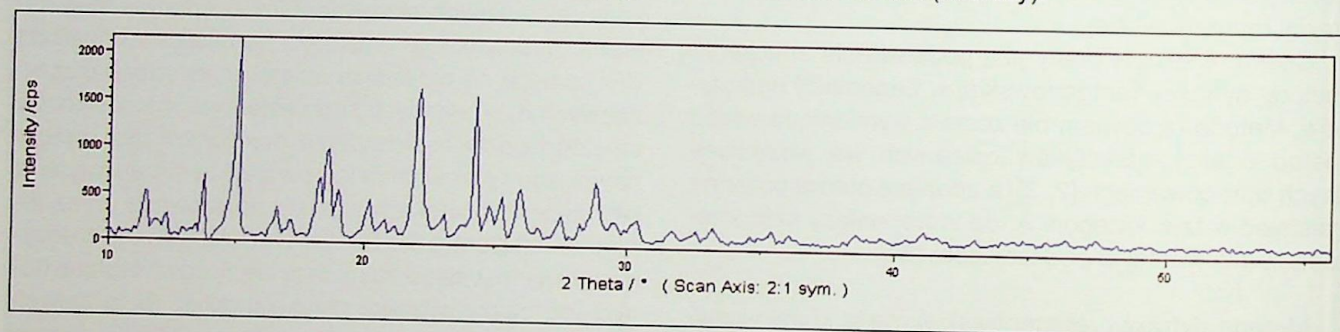
Ryc. 1. Równanie Bragga-Wulfa i jego graficzne odwzorowanie
Fig. 1. Bragg-Wulff equation and its graphic representation
źródło: opracowanie własne na podstawie Connolly J.R. (2007) – Elementary Crystallography for X-Ray Diffraction. Text for Students

Wypożyczenie pracowni dyfrakcji rentgenowskiej w Wydziale Fizykochemii CLK KGP stanowi dyfraktometr XRD 7 firmy SEIFERT FPM z zastosowanym licznikiem scyntylacyjnym, który jest dostatecznie czuły do analizy jakościowej substancji krystalicznych. Analizowany preparat jest w postaci proszkowej i sprasowanej, a umieszczony jest na specjalnych podstawkach. Podstawkę wraz z badaną substancją mocuje się w centralnej części dyfraktometru zwanej goniometrem. Wyzwolone w lampie rentgenowskiej promieniowanie rentgenowskie pada na preparat i odbija się od niego, trafiając na detektor scyntylacyjny zgodnie z równaniem Bragga-Wulfa (ryc. 1).

Efekt końcowym każdej analizy jest graficzny zapis pomiaru zwany dyfraktogramem (ryc. 2). Na dyfraktogramie w prostokątnym układzie współrzędnych, gdzie oś X tworzy wielkość kąta padania/odbicia (dy-

może potwierdzić lub wykluczyć obecność substancji czynnej w badanej próbce. Daje też informacje o postaci chemicznej substancji badanej (np. czy jest to siarczan, czy chlorowodorek, czy też inny rodzaj związku). Ponadto umożliwia poznanie składu mieszaniny, jeśli taka jest badana. Jest to istotne uzupełnienie informacji o np. obecności substancji nieorganicznych, które są często dodawane jako wypełniacze do substancji psychoaktywnych. W roku 2008 wykonano nieco ponad 600 analiz dyfraktometrycznych, co może świadczyć o popularności metody. Największy udział w tej liczbie mają analizy środków odurzających i substancji psychotropowych, takich jak:

- amfetamina,
- kokaina,
- heroina,
- tabletki MDMA (ekstazy).



Ryc. 2. Przykład dyfraktogramu
Fig. 2. Example of diffractogram
źródło (ryc. 2–10): autor

frakcji) 2θ , a oś Y intensywność względna pików, widoczny jest obraz dyfrakcyjny badanej próbki w postaci szeregu pików, które odpowiadają ugięciu promieniowania rentgenowskiego od danej rodziny płaszczyzn hkl w badanej mieszaninie.

Zastosowanie dyfrakcji rentgenowskiej w Wydziale Fizykochemii CLK KGP

Jak już wspomniano, metoda dyfrakcji rentgenowskiej w Wydziale Fizykochemii jest stosowana od 1997 roku. Obecnie używa się jej przede wszystkim w analizie jakościowej związków organicznych, głównie narkotyków, substancji stanowiących domieszki w narkotykach (związki organiczne i nieorganiczne) oraz substancji niewiadomego pochodzenia. Ponieważ analiza dyfraktometryczna jest nieniszcząca i stosunkowo szybka (czas jednej analizy wraz z wyszukaniem w bazie danych wynosi około 15 minut), stała się metodą bardzo popularną i konkurencyjną w stosunku do spektrofotometrii w podczerwieni, podczas której analizowana próbka ulega zniszczeniu, a także jej identyfikacja nie zawsze jest jednoznaczna. Wynik każdej analizy

Przykłady identyfikacji mieszanin metodą XRD

Największą grupę badanych metodą XRD substancji psychoaktywnych stanowią analizy amfetaminy. Badane są zwykle substancje w postaci proszku, a pochodzące głównie z konfiskat policyjnych od dilerów narkotykowych lub konsumentów, jak również te zabezpieczone w nielegalnych laboratoriach produkujących amfetaminę na terenie Polski. Polska jest bowiem, obok Holandii, Belgii i Wlk. Brytanii, czołowym producentem amfetaminy w Europie [7].

Czysty siarczan amfetaminy jest proszkiem koloru białego lub lekko różowego. Działki sprzedawane na rynku narkotykowym zwykle jednak zawierają szereg wypełniaczy, o których będzie mowa w dalszej części artykułu. Z punktu widzenia dyfrakcji rentgenowskiej istotne jest to, iż omawiany siarczan amfetaminy jest substancją krystaliczną. Struktura siarczanu amfetaminy jest jednoskośna z przynależnością do grupy przestrzennej $P2_1$ [8]. Komórka elementarna siarczanu amfetaminy $(C_9H_{14}N)_2^{2+} \cdot (SO_4)^{2-}$ składa się z ośmiu grup CH_3 i ośmiu grup NH_3 połączonych grupami SO_4^{2-} . Baza PDF-2, z której korzysta się w przypadku identyfika-

cji substancji przy badaniu dyfraktometrycznym, zawiera kilka pozycji scharakteryzowanych jako siarczan amfetaminy. Ten swoisty polimorfizm może wynikać ze sposobu wytrącania siarczanu amfetaminy w nielegalnym laboratorium [5]. Dlatego podczas analizowania dyfraktogramów należy zachować czujność i w przypadku braku automatycznego przyporządkowania systematycznie przeszukać bazę, odwołując się do konkretnej pozycji. Szczegółowe omówienie sposobu korzystania z bazy PDF-2 zostało opisane w artykule pt.: „Oznaczanie śladów krystalicznych zabezpieczanych w nielegalnych laboratoriach oraz składu jakościowego próbek amfetaminy metodą XRD” [5].

Jak już wspomniano, tzw. amfetamina rynkowa, czyli ta dystrybuowana przez dilerów, to mieszanina siarczanu amfetaminy i innych dodatków, na które mogą się składać różne substancje organiczne i nieorganiczne. Wśród wypełniaczy obecnie na rynku króluje uwodniona kreatyna, która jest składnikiem około 75% badanych próbek. W ciągu ostatnich 3 lat (od 2006 do 2008 roku) jej rola stale rośnie, choć ostatnio zamiast tego wypełniacza zaczęła pojawiać się glutamina. Uwodniona kreatyna, czyli tzw. monohydrat kreatyny, jest substancją koloru intensywnie białego i w mieszaninie z siarczanem amfetaminy stanowi rynkowo chwytliwy produkt o pożądanej barwie i konsystencji. Kolejnym wypełniaczem jest skrobia zaobserwowana w około 15% próbek. Skrobia jest jednak trudno identyfikowalna metodą XRD ze względu na swoją znaczną amorficzność. Można ją zidentyfikować optycznie za pomocą mikroskopu polaryzacyjnego, w którego obrazie skrobia tworzy charakterystyczne kuliste ziarna z widocznymi czarnymi krzyżami tzw. izogir, czyli krzywych jednakowego natężenia wiązki światła spolaryzowanego przechodzącego przez kryształ (ryc. 3). Innym wypełniaczem dość chętnie stosowanym do rozcieńcza-

nia siarczanu amfetaminy jest laktoza. W ciągu ostatnich 3 lat jej rola jako wypełniacza była stabilna i stanowiła ona około 12% wszystkich badanych próbek. Na znaczeniu traci z kolei glukoza, której ilość w ciągu 3 lat spadła z 28% w roku 2006 do 6% w roku 2008. Podobny trend wykazuje inna popularna substancja – wodorowęglan sodu, którego zawartość spadła z 17% w roku 2006 do 8% w roku 2008. Na dość stabilnym, lecz niskim poziomie (6%) kształtuje się udział kofeiny w mieszaninach z siarczanem amfetaminy. Pozostałe substancje, takie jak talk, sacharoza (cukier spożywczy) czy chlorek sodu (sól kuchenna), stanowią margines dodatków w mieszaninach z siarczanem amfetaminy i ich zawartość nie przekracza 3%. Całość zagadnienia ilustruje tabela.

Tabela

Zawartości dodatków używanych jako wypełniacze w siarczanie amfetaminy

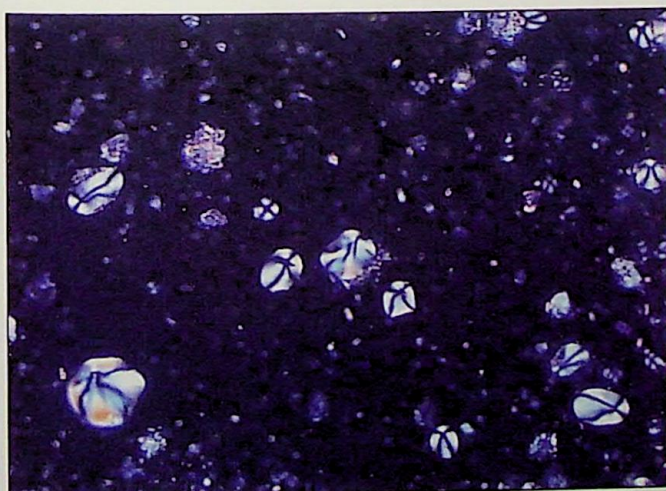
Content of additives used as diluents in amphetamine sulphate

Dodatki do amfetaminy	Zawartość w % (rok 2006)	Zawartość w % (rok 2008)
uwodniona kreatyna	68%	75%
laktoza	11%	13%
wodorowęglan sodu	17%	8%
glukoza	28%	6%
kofeina	5%	7%
talk, sacharoza, chlorek sodu	< 3%	< 3%
skrobia	14%	16%
1-FEA	18%	90%

źródło: opracowanie własne

Problem identyfikacji 1-fenyletyloaminy (1-FEA) a metoda XRD

Związek chemiczny zwany 1-FEA (1-fenyletyloaminą) przez ostatnie lata stał się głównym składnikiem mieszanin zawierających siarczan amfetaminy. Jego ilość w 2006 roku wynosiła jedynie 18%, aby w roku 2008 osiągnąć już 90% (tab.). Obecnie praktycznie wszystkie badane próbki siarczanu amfetaminy zawierają domieszkę 1-FEA. Związek ten w mieszaninach z siarczanem amfetaminy występuje także w formie siarczanu. Nie jest on jednak typowym wypełniaczem, gdyż jego pojawienie się w końcowym produkcie syntezy jest związane z samym procesem chemicznym. Wszystkie inne wypełniacze, takie jak uwodniona kreatyna, laktoza, skrobia czy kofeina, nie są związane



Ryc. 3. Ziarna skrobi pod mikroskopem polaryzacyjnym; pow. 30x
Fig. 3. Starch grains under polarisation microscope (x30)

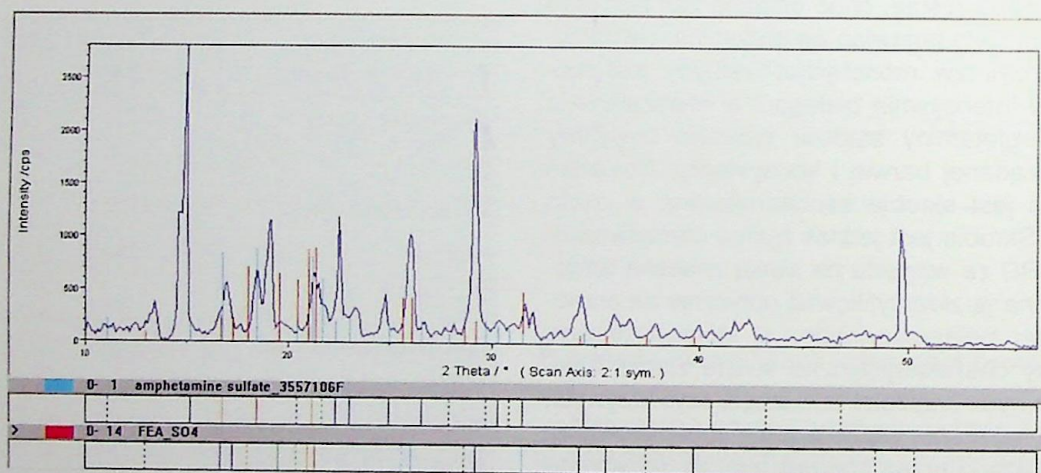
bezpośrednio z etapami syntezy siarczanu amfetaminy; jedynie dodaje się je do już gotowego produktu. W przypadku 1-FEA jest inaczej. Pojawienie się tego związku jest uwarunkowane już na pierwszym etapie syntezy amfetaminy. Jeśli zamiast odpowiedniego prekursora, czyli w tym przypadku BMK (benzylometyletonu), użyje się częściowo lub całkowicie acetofenonu, to finalnym produktem będzie albo siarczan amfetaminy zanieczyszczony siarczanem 1-FEA, albo w skrajnym przypadku sam siarczan 1-FEA. Szczegółowe informacje dotyczące syntezy 1-FEA (1-feniloetyloaminy) zostały zaprezentowane w pracy pt.: „ α -feniloetyloamina – nowy rodzaj domieszki siarczanu amfetaminy” [9].

Metoda XRD do identyfikacji siarczanu 1-FEA jest nieco zawodna. Przede wszystkim w bazie danych PDF-2 brak jest takiego związku. Aby go dodać, należało go zsyntetyzować, a następnie zarejestrować jego widmo. Dzięki uprzejmości Laboratorium Kryminalistycznego Komendy Wojewódzkiej Policji w Bydgosz-

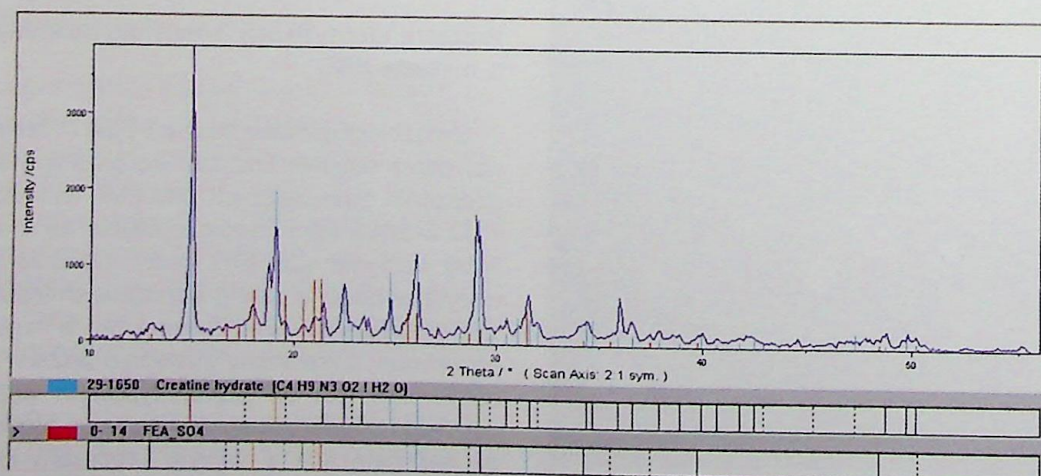
czy, w którym dokonano syntezy siarczanu 1-FEA, autor miał możliwość wykonania analiz dyfraktometrycznych wymienionego związku. Zarejestrowane widmo jest znacząco różne od widma siarczanu amfetaminy (ryc. 4), ale w mieszaninie właśnie z siarczanem amfetaminy często jest maskowane. Dopiero gdy proporcje ilościowe znacznie wskazują na dużą zawartość siarczanu 1-FEA, można go zidentyfikować, nawet jeśli mieszanina składa się jeszcze z innych wypełniaczy (ryc. 5), takich jak uwodniona kreatyna czy laktoza. Często obecność siarczanu 1-FEA obok siarczanu amfetaminy maskuje widmo tego pierwszego, pomimo że 1-feniloetyloamina jest wykrywana metodami chromatograficznymi.

Inne narkotyki a metoda XRD

Badania metodą dyfrakcji rentgenowskiej XRD dotyczą nie tylko siarczanu amfetaminy. Jak już wspomniano w tej pracy, można badać wszelkie substancje



Ryc. 4. Dyfraktogram mieszaniny siarczanu amfetaminy i siarczanu 1-FEA
Fig. 4. Diffractogram of amphetamine sulphate and 1-FEA sulphate mixture

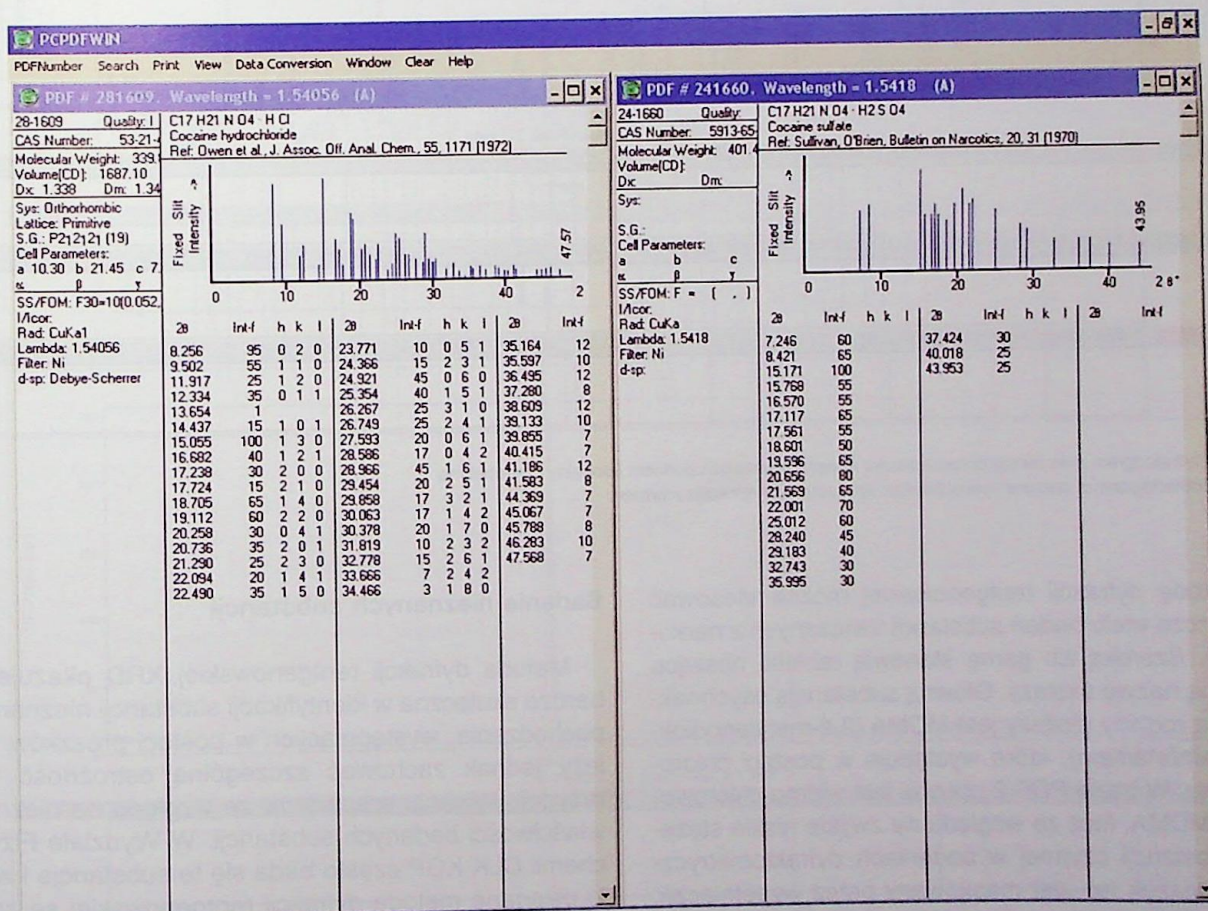


Ryc. 5. Dyfraktogram mieszaniny siarczanu 1-FEA i uwodnionej kreatyny
Fig. 5. Diffractogram of 1-FEA sulphate and hydrated creatine mixture

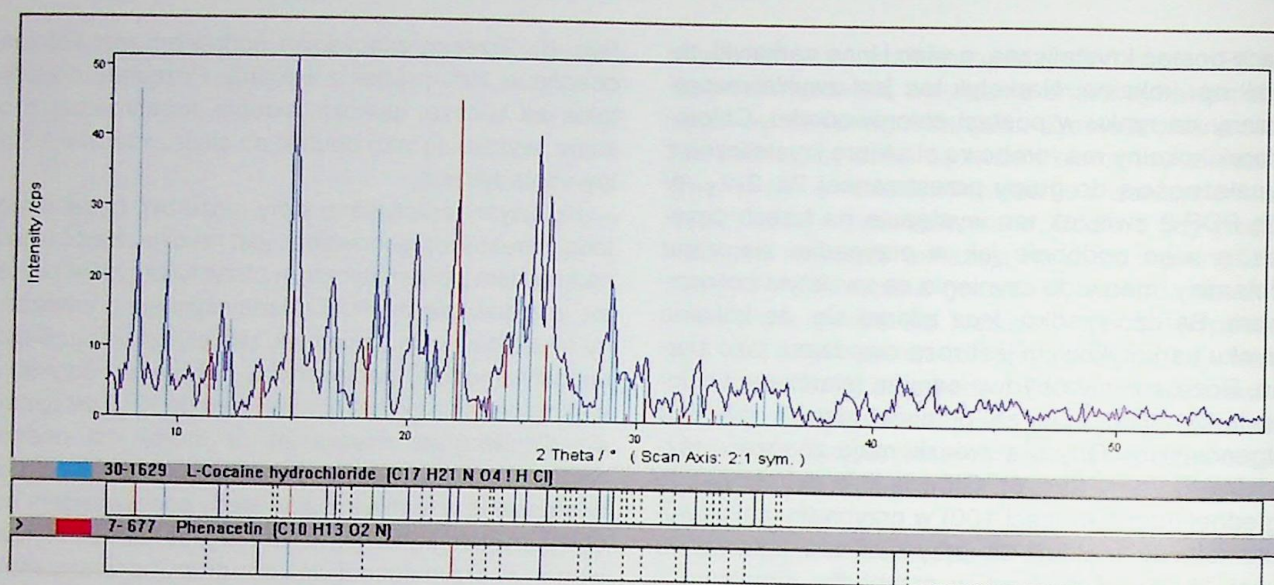
mające postać krystaliczną, a więc i inne narkotyki, takie jak np. kokaina. Narkotyk ten jest zwykle rozprawiany na rynku w postaci chlorowodoru. Chlorowodorek kokainy ma rombową strukturę krystaliczną z przynależnością do grupy przestrzennej $P2_12_12_1$. W bazie PDF-2 związek ten występuje na trzech pozycjach, a więc podobnie jak w przypadku siarczanu amfetaminy, mamy do czynienia ze swoistym polimorfizmem. Bardzo rzadko, lecz zdarza się, że kokaina na rynku narkotykowym jest rozprawiana jako siarczan. Rozróżnienie obydwu odmian (siarczanu i chlorowodoru) następuje za pomocą metody dyfrakcji rentgenowskiej. Obydwa związki mają znacząco różne dyfraktogramy (ryc. 6). Główna linia dyfrakcyjna (o względnej intensywności 100) w przypadku chlorowodoru kokainy znajduje się przy wielkości kątowej 2θ równej 15,055, natomiast w przypadku siarczanu – 20,656. Podobnie jak w przypadku siarczanu amfetaminy, także chlorowodorek kokainy w działkach ulicznych występuje w postaci rozcieńczonej. Głównym rozcieńczalnikiem jest fenacetyna, która występuje praktycznie w 70% próbek z kokainą (ryc. 7). Kolejnym wypełniaczem jest chlorowodorek lidokainy, obecny w 24% próbek z chlorowodorkiem kokainy

(ryc. 8). Trzecim znaczącym dodatkiem jest kofeina, obecna w 10% próbek z kokainą. Pozostałe dodatki, takie jak laktoza, glukoza, skrobia, kreatyna czy prokaina, występują jako dodatki do chlorowodoru kokainy sporadycznie.

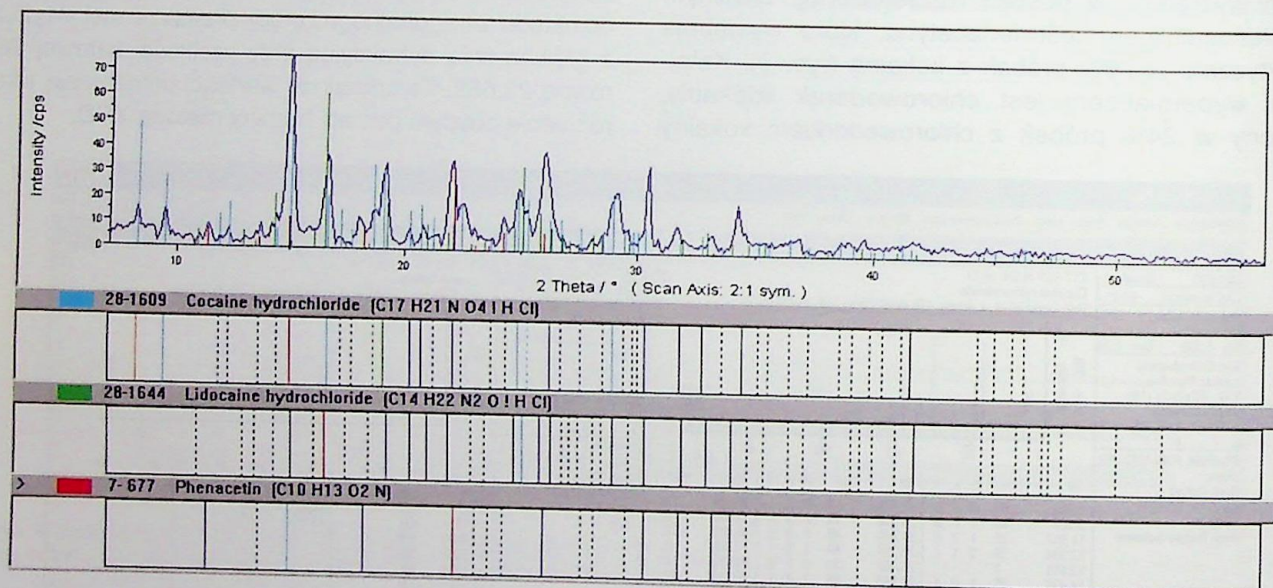
Kolejnym narkotykiem, który może być badany metodą dyfrakcji rentgenowskiej, jest heroina. Heroina jest narkotykiem półsyntetycznym otrzymywanym w procesie acetylowania morfiny, składającym się z mieszaniny alkaloidów m.in. takich jak: diacetylmorfina, 6-monoacetylmorfina, papaweryna, noskapina. Zwykle w efekcie badania próbki heroiny metodą XRD otrzymuje się dyfraktogram mieszaniny, w której jest obecna wspomniana na wstępie diacetylmorfina. Może ona występować w formie zasady, wtedy pod względem budowy krystalograficznej zalicza się do układu rombowego z przynależnością do grupy przestrzennej $P2_12_12_1$ z główną linią dyfrakcyjną przy wielkości kątowej 2θ równą 16,800 lub też może występować w postaci uwodnionego chlorowodoru z przynależnością do układu tetragonalnego i grupy przestrzennej $P4_12_12$ z główną linią dyfrakcyjną przy wielkości kątowej 2θ równą 23,662. Te odmienne wartości umożliwiają rozróżnienie obydwu postaci heroiny metodą XRD.



Ryc. 6. Porównanie kart z bazy PDF-2 charakteryzujących chlorowodorek kokainy i siarczan kokainy
Fig. 6. Comparison of PDF-2 database cards for cocaine hydrochloride and cocaine sulphate



Ryc. 7. Dyfraktogram mieszaniny chlorowodoru kokainy z fenacetyną
Fig. 7. Diffractogram of cocaine hydrochloride, and fenacetin mixture

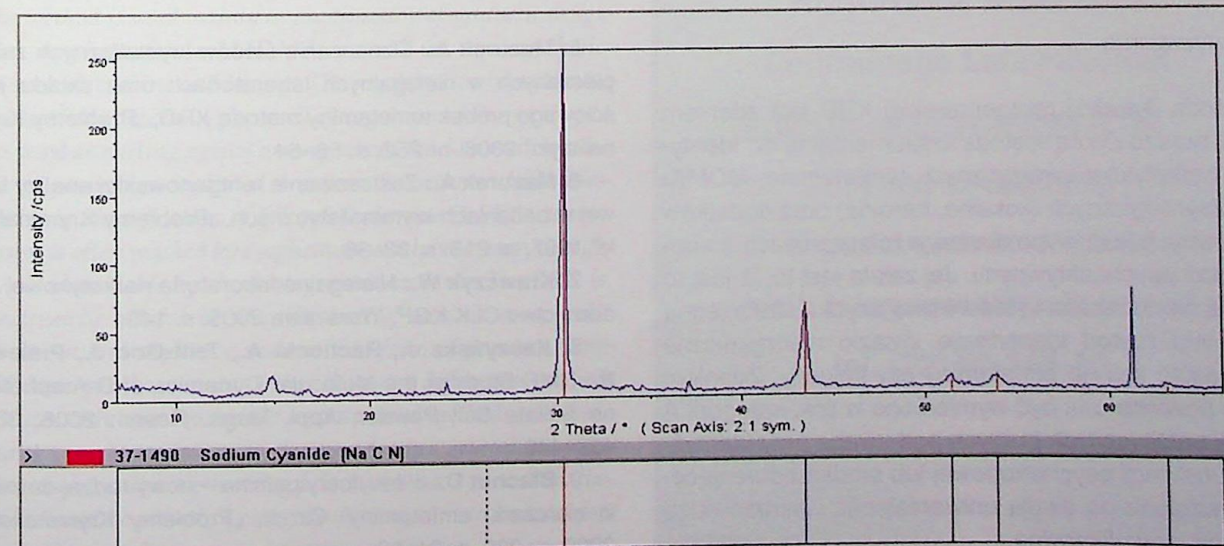
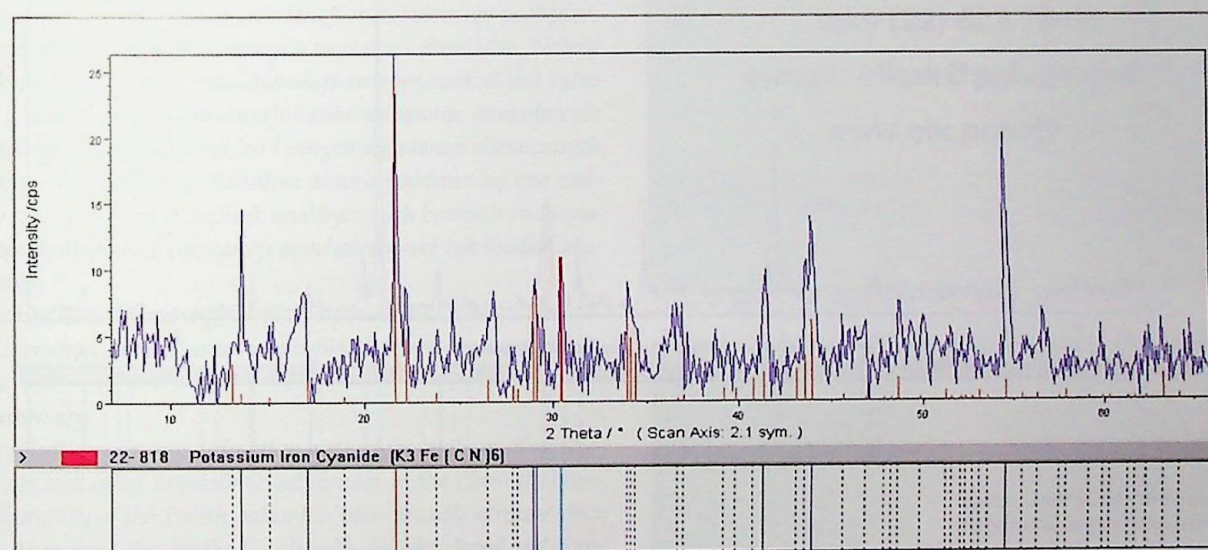
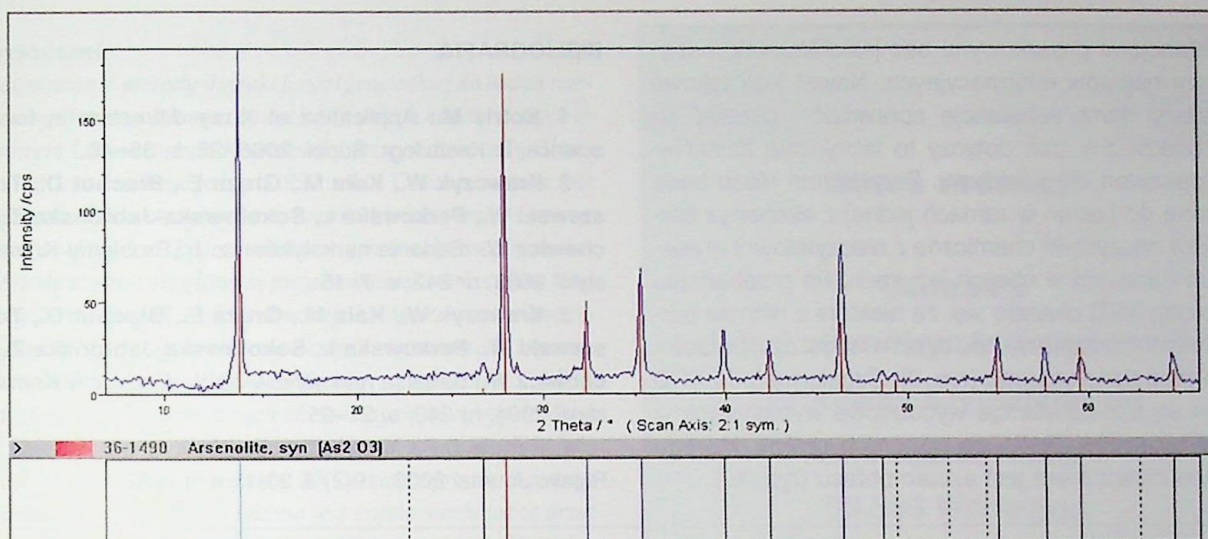


Ryc. 8. Dyfraktogram mieszaniny chlorowodoru kokainy z chlorowodorkiem lidokainy i fenacetyną
Fig. 8. Diffractogram of cocaine hydrochloride, lidocaine and fenacetin mixture

Metodę dyfrakcji rentgenowskiej można stosować do jeszcze wielu badań substancji związanych z narkotykami. Szeroką ich gamę stanowią tabletki noszące wspólną nazwę ekstazy. Główną substancją psychoaktywną z rodziny ekstazy jest MDMA (3,4-metylenodioksymetamfetamina), która występuje w postaci chlorowodoru. W bazie PDF-2 obecne jest widmo chlorowodoru MDMA, lecz ze względu na zwykle niskie stężenie substancji czynnej w badaniach dyfraktometrycznych związek ten jest maskowany przez wypełniacze. Należą do nich głównie: kofeina, laktoza, skrobia i sorbitol.

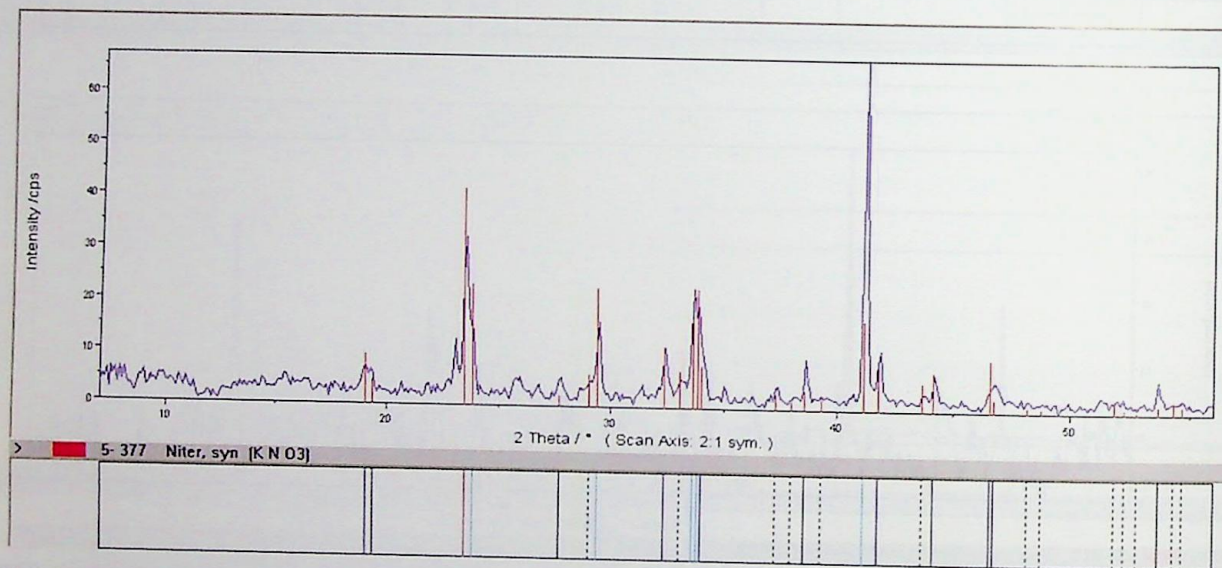
Badania nieznanymi substancjami

Metoda dyfrakcji rentgenowskiej XRD okazuje się bardzo skuteczna w identyfikacji substancji nieznanego pochodzenia, występujących w postaci proszków. Należy jednak zachować szczególną ostrożność przy przygotowywaniu preparatów ze względu na nieznane właściwości badanych substancji. W Wydziale Fizykochemii CLK KGP często bada się te substancje i wyniki osiągane metodą dyfrakcji rentgenowskiej są zadowalające. Do analiz trafiają np. naczynia wypełnione proszkiem w opakowaniach bez etykiet czy też torebki



Ryc. 9. Dyfraktogramy cyjanków sodu, potasowo-żelazowego i tlenku arsenu
 Fig. 9. Diffractogram of sodium and potassium-ferrous cyanide, and arsenic oxide

z substancjami proszkowymi bez jakichkolwiek metryczek czy napisów informacyjnych. Nawet jeśli takowe są, należy daną substancję sprawdzić i określić jej skład chemiczny (nie dotyczy to fabrycznie zamkniętych opakowań oryginalnych). Przykładem niech będą przesłane do badań w ramach jednej z ekspertyz bardzo stare odczynniki chemiczne z nieczytelnymi etykietami lub napisami w obcych językach. Po przebadaniu ich metodą XRD okazało się, że niektóre z nich są bardzo silnymi truciznami, np. cyanki sodu czy potasu i żelaza oraz tlenek arsenu (ryc. 9). Często metodą XRD badane są też substancje wybuchowe występujące w postaci proszków. Bada się np. proch czarny, którego głównym składnikiem jest azotan potasu (ryc. 10).



Ryc. 10. Dyfraktogram azotanu potasu
Fig. 10. Potassium nitrate diffractogram

Podsumowanie

Metoda dyfrakcji rentgenowskiej XRD jest zdaniem autora bardzo dobrą metodą instrumentalną do identyfikacji narkotyków syntetycznych (amfetamina, MDMA) czy półsyntetycznych (kokaina, heroina) oraz dodatków stosowanych jako wypełniacze w mieszaninach z substancjami psychoaktywnymi. Jej zaletą jest to, iż jest to metoda nieniszcząca i stosunkowo szybka. Jako jedna z niewielu metod identyfikuje związki nieorganiczne oraz postać soli np. amfetaminy czy kokainy. Zdaniem autora powinna ona być wymieniona w tzw. kategorii A technik analitycznych branych pod uwagę przy identyfikacji substancji psychotropowej lub środka odurzającego ze względu na swoją uniwersalność i bardzo dużą zdolność identyfikacyjną.

Robert Bachliński

BIBLIOGRAFIA

1. Kotrlý M.: Application of X-ray diffraction in forensic science, *Z. Kristallogr. Suppl.* 2006, 23, s. 35–40.
2. Krawczyk W., Kała M., Gruza E., Błachut D., Tomaszewski W., Perkowska I., Sokołowska-Jabłońska Z., Lechowicz W.: Badania narkotyków cz. I, „Problemy Kryminalistyki” 2003, nr 242, s. 7–15.
3. Krawczyk W., Kała M., Gruza E., Błachut D., Tomaszewski W., Perkowska I., Sokołowska-Jabłońska Z., Lechowicz W.: Badania narkotyków cz. II, „Problemy Kryminalistyki” 2004, nr 243, s. 21–25.
4. Rendle D.F.: X-ray diffraction in forensic science, *The Rigaku Journal* 2003, 19(2) & 20(1), s. 11–22.

5. Mazurek A.: Oznaczanie śladów krystalicznych zabezpieczonych w nielegalnych laboratoriach oraz składu jakościowego próbek amfetaminy metodą XRD, „Problemy Kryminalistyki” 2006, nr 252, s. 58–64.

6. Mazurek A.: Zastosowanie rentgenowskiej analizy fazowej w badaniach kryminalistycznych, „Problemy Kryminalistyki” 1997, nr 218, s. 33–38.

7. Krawczyk W.: Nielegalne laboratoria narkotykowe, Wydawnictwo CLK KGP, Warszawa 2005, s. 140.

8. Kaszyńska J., Rachocki A., Tritt-Goc J., Piślewski N.: NMR Study of the Molecular Dynamics of D-Amphetamine Sulfate Salt Powder, *Appl. Magn. Reson.* 2008, 33, s. 439–446.

9. Błachut D.: α -fenyloetyloamina – nowy rodzaj domieszki siarczanu amfetaminy. Cz. I., „Problemy Kryminalistyki” 2000, nr 230, s. 24–30.

Streszczenie

Zastosowanie metody dyfrakcji rentgenowskiej do badań narkotyków syntetycznych oraz innych substancji krystalicznych w Centralnym Laboratorium Kryminalistycznym Komendy Głównej Policji jest możliwe już od 1997 roku. Obecnie metoda jest już dopracowana, a otrzymywane wyniki bardzo pomocne w wykonywaniu ekspertyz kryminalistycznych z zakresu fizykochemii. Metodę stosuje się głównie przy badaniach narkotyków syntetycznych, takich jak amfetamina czy MDMA, oraz półsyntetycznych, takich jak kokaina czy heroina. Oznacza się z powodzeniem substancję psychoaktywną oraz domieszki związków organicznych i nieorganicznych stosowanych jako wypełniacze, wśród których obecnie dominuje uwodniona kreatyna. Niekiedy trudność w identyfikacji metodą XRD może sprawić 1-fenyletyloamina (1-FEA), której widmo jest często maskowane przez siarczan amfetaminy, pomimo że 1-FEA jest identyfikowalna metodami chromatograficznymi. Metoda XRD jest także bardzo pomocna przy identyfikacji substancji niewiadomego pochodzenia oraz substancji wybuchowych w postaci proszków. Należy jednak pamiętać, że metoda dyfrakcji rentgenowskiej jest tylko jedną z metod instrumentalnych i stanowi istotne uzupełnienie metodologii badań narkotyków i innych substancji chemicznych o budowie krystalicznej. Zdaniem autora powinna się ona znaleźć w tzw. kategorii A technik analitycznych branych pod uwagę przy identyfikacji substancji psychotropowej lub środka odurzającego.

Słowa kluczowe: dyfrakcja rentgenowska, XRD, dyfraktogram, komórka elementarna, identyfikacja, substancja psychoaktywna

Summary

Application of x-ray diffraction method for analyses of synthetic drugs and other crystalline substances in the Central Forensic Laboratory of the Polish police has been possible already since 1997. At present this method is already well-developed and obtained results prove very helpful in casework in physicochemistry.

The method is used mainly in examination of synthetic drugs such as amphetamine or MDMA, as well as semi-synthetic drugs such as cocaine and heroin. The psychoactive ingredients, are successfully determined as well as organic and inorganic additives used as cutting agents among whom the dominating substance is nowadays hydrated creatine. Sometimes difficulties may arise in identification of 1-phenylethylamine (1-FEA), whose spectrum is often masked by amphetamine sulphate, even though 1-FEA is identifiable by chromatographic methods. The XRD is also extremely helpful in identification of substances of unknown origin and explosive materials in form of powders. One should, however, bear in mind that the x-ray diffraction method constitutes only one among the instrumental methods and a significant complementation to drug and other crystalline substances examination methodology. It is Author's view that the method should be placed in category A analytical techniques for identification psychotropic or narcotic substances.

Keywords: x-ray diffraction, XRD, diffractogram, elementary cell, psychoactive substance.

Adres redakcji

**Centralne
Laboratorium Kryminalistyczne KGP
„Problemy Kryminalistyki”
Aleje Ujazdowskie 7
00-583 Warszawa
tel. (22) 60-155-48
faks (22) 621-79-16
e-mail: clkpk@policja.gov.pl
www.clk.policja.pl**

**Biblioteka Naukowa
Centralnego Laboratorium
Kryminalistycznego KGP
czynna codziennie**

**w godzinach 8.15–16.00
e-mail: b.legowicz@policja.gov.pl
tel. (22) 60-145-30**