

О возможности использования хемометрического (дискриминантного) метода анализа при сравнительном исследовании героина

Л.И. Модинава, Н.А. Щербаков

Экспертно-криминалистический центр Главного управления Министерства внутренних дел Российской Федерации по Нижегородской области, Нижний Новгород 603134, Россия

Аннотация. Цель работы – установление возможности использования хемометрического (дискриминантного) метода при анализе результатов инфракрасной спектроскопии средней области и хромато-масс-спектрометрии для сравнительного исследования героина с целью установления общего источника происхождения. Преимуществом данного способа сравнительного исследования по сравнению с существующими является сокращение времени получения результата, наглядность и автоматизация процесса сравнения, что немаловажно при сравнительном исследовании большого количества объектов и ведении соответствующего вида экспертно-криминалистического учета. Показано, что результаты, полученные путем хемометрической обработки данных двух некоррелируемых друг с другом методов анализа (ИК-спектроскопии и хромато-масс-спектрометрии), совпали.

Ключевые слова: хемометрика, дискриминантный анализ, героин, ИК-спектроскопия, хромато-масс-спектрометрия

Для цитирования: Модинава Л.И., Щербаков Н.А. О возможности использования хемометрического (дискриминантного) метода анализа при сравнительном исследовании героина // Теория и практика судебной экспертизы. 2021. Т. 16. № 2. С. 61–68.

<https://doi.org/10.30764/1819-2785-2021-2-61-68>

On the Possibility of Using the Chemometric (Discriminant) Method of Analysis in the Comparative Study of Heroin

Larisa I. Modinova, Nikolai A. Shcherbakov

Forensic Center of the Main Department of the Ministry of Internal Affairs of the Russian Federation in the Nizhny Novgorod region, Nizhny Novgorod 603134, Russia

Abstract. The paper aimed to ascertain the possibility of using the chemometric (discriminant) method when analyzing the results of mid-range IR spectroscopy and gas chromatography-mass spectrometry for a comparative study of heroin to establish a common source of origin. The advantage of this method of comparative research in comparison to the existing ones is the reduction in the time for obtaining the result, the clarity and automation of the comparison process, which is essential for the comparative study of a large number of objects and the keeping of the corresponding type of forensic accounting. The paper shows that the results obtained by chemometric processing of data from two non-correlating analysis methods (IR spectroscopy and gas chromatography-mass spectrometry) coincided.

Keywords: chemometrics, discriminant analysis, heroin, IR spectroscopy, gas chromatography-mass spectrometry

For citation: Modinova L.I., Shcherbakov N.A. On the Possibility of Using the Chemometric (Discriminant) Method of Analysis in the Comparative Study of Heroin. *Theory and Practice of Forensic Science*. 2021. Vol. 16. No. 2. P. 61–68. (In Russ.). <https://doi.org/10.30764/1819-2785-2021-2-61-68>

Введение

Среди множества судебных экспертиз, проводимых государственными судебно-экспертными учреждениями России, отдельное положение занимают сравнительные экспертизы. Их задача – определение принадлежности одного или нескольких объектов к одной группе (роду), т. е. установление общей групповой (родовой) принадлежности либо идентичности объектов. В ходе производства экспертиз устанавливаются параметры, в которых заложены индивидуализирующие признаки объектов. В качестве таких параметров для наркотических средств и психотропных веществ выступает качественный и количественный состав сравниваемых объектов. При установлении качественного состава главная роль отводится определению «минорных» компонентов объектов, так как именно микрокомпонентный состав относится к свойствам, характеризующим процесс их производства (синтеза), хранения, транспортировки и др., в результате чего объекты приобретают индивидуализирующие признаки.

Сравнительные исследования наркотических средств и психотропных веществ в целом вписываются в общую тактику проведения сравнительных исследований, но все же имеют свои особенности. Так, в соответствии с имеющимися в настоящее время методическими рекомендациями [1–3] при проведении сравнительных экспертиз наркотических средств и психотропных веществ возможны три варианта выводов: 1) вещества могли ранее составлять единую массу; 2) вещества могли иметь общий источник происхождения по сырью и технологии изготовления основного наркотически активного компонента; 3) вещества не составляли ранее единой массы и не имеют общего источника происхождения по сырью и технологии изготовления основного наркотически активного компонента.

Основными аналитическими методами, используемыми при сравнительных исследованиях наркотических средств и психотропных веществ, являются газовая хроматография с различными способами детектирования (ГХ-МС, ГХ-ПВД) и ИК-спектроскопия. При производстве данного вида экспертиз устанавливается количественное содержание основных наркотических (психотропных) веществ и проводится качественный анализ технологических примесей процесса синтеза, промежуточных компонентов синтеза, а также микрокомпо-

нентного состава. Устанавливается и качественный состав наполнителей, в том числе фармакологически активных добавок. Данные исследования подразумевают применение продолжительных по времени методик, а в совокупности с тем, что количество объектов нередко достигает нескольких десятков, а иногда и сотен, общее время проведения сравнительной экспертизы может значительно превышать сроки, отведенные соответствующими нормативно-правовыми актами, регулирующими экспертно-криминалистическую деятельность¹. Существенный вклад в сроки производства экспертиз вносит также интерпретация результатов, полученных каждым методом, так как сравнение большого массива данных происходит обычно без использования какой-либо автоматизированной системы установления сходства/различия.

Применение альтернативных способов обработки и классификации большого числа данных посредством статистических методов, заложенных в программные продукты, позволило бы значительно сократить время производства сравнительных экспертиз. В этом могут помочь статистические методы обработки и классификации большого числа данных, а именно хемометрические методы, включающие сложные алгоритмы обработки, в особенности методы анализа многооткликовых и многофакторных экспериментов.

Известно решение классификационных и идентификационных задач с помощью метода главных компонент в отношении фармпрепаратов [4, 5], лакокрасочных материалов [6], при идентификации нефтей [7, 8], оценке возраста документов [9]. Имеются данные о математической обработке спектров (ИК-, УФ-, ЯМР-) при анализе смесей веществ методом независимых и главных компонент [10, 11] и об использовании хемометрических методов при обработке результатов ИК-спектрометрического и хромато-масс-спектрометрического исследований для сравнительного анализа таких наркотических средств, как кокаин, таблетки экстази, наркосодержащих растений, например конопли [12–14]. За рубежом использование хемометрики в судебной химии, судебной медицине и других направлениях судебной экспертной деятельности

¹ Приказ МВД России от 29.06.2005 № 511 «Вопросы организации производства судебных экспертиз в экспертно-криминалистических подразделениях органов внутренних дел Российской Федерации».

расширяется [12–14], однако в российской экспертной практике данный способ обработки больших массивов данных пока не нашел такого применения.

Технические возможности, исполнение и программное обеспечение современного оборудования позволяют получать высокоинформативные спектры. Так, большинство ИК-спектрометров используют Фурье преобразование и способны проводить сканирование с разрешением 1 см^{-1} , а точность определения массы иона у некоторых моделей масс-спектрометров может составлять 0,0001 а. е. м. Экспорт полученных данных в различные форматы (CSV, JDX и др.) позволяет преобразовать спектры из привычных форматов в табличные данные, количество строк и столбцов в которых может достигать от нескольких сотен до нескольких тысяч. Именно это и позволяет установить различия между сравниваемыми объектами, которые трудно, а часто и невозможно выявить в результате визуального анализа хроматограмм (или ИК-спектров) сравниваемых объектов.

Цель настоящей работы – установление возможности использования дискриминантного метода при анализе результатов ИК-спектроскопии средней области и хромато-масс-спектрометрии для сравнительного исследования героина с целью определения единого источника происхождения.

Вид наркотического средства был выбран не случайно. Метод дискриминантного анализа хорошо работает при анализе образцов разного состава, но содержащих один и тот же ингредиент. В этом случае

во всех стандартах присутствует исследуемое наркотическое средство, но другие компоненты стандартов различны. Героин является смесевым продуктом, в состав которого помимо основных наркотически активных компонентов (диацетилморфин, ацетилкодеин, 3- и 6-моноацетилморфин) входят и специально вносимые добавки: фармакологически активные вещества (кофеин, дифенгидрамин, фенобарбитал, фенацетин и т. п.), наполнители (глюкоза, лактоза, фруктоза, крахмал, хлорид натрия и т. п.), а также вещества, присутствие которых обусловлено способом получения героина (ацетилированные норморфин и норкодеин, меконин, гидрокотарнин, оксидиморфин) [1].

Объекты и методы

Объекты исследования. Объектами исследования были образцы героина из пяти источников изъятия – источники А (77 объектов), В (56 объектов), С (78 объектов), D (30 объектов), Е (32 объекта). По результатам сравнительных экспертиз, проведенным по действующим в настоящее время методическим рекомендациям [1, 2], было установлено, что объекты из источников D и Е могли ранее составлять единую массу. Количественное содержание основных наркотически активных компонентов, а также качественный состав фармакологически активных добавок, микропримесей, наполнителей в исследуемых образцах приведены в таблицах 1 и 2. Качественный и количественный состав объектов определяли в соответствии с методическими рекомендациями [1, 2].

Таблица 1. Количественное содержание основных наркотически активных компонентов в образцах разных источников
Table 1. Quantitative content of the main narcotic active components in samples from different sources

Источник	Среднее содержание героина, масс. %	Среднее содержание ацетилкодеина, масс. %	Среднее содержание 6-моноацетилморфина, масс. %
A	9,9	0,7	1,0
B	3,4	0,3	1,0
C	5,8	0,3	1,2
D	13,0	0,5	0,9
E	13,0	0,5	0,9

Таблица 2. Качественный состав фармакологически активных добавок, микропримесей и наполнителей в образцах разных источников**Table 2.** Qualitative composition of pharmacologically active additives, micro-admixtures and fillers in samples from different sources

Источник	Фармакологически активные добавки	Микропримеси	Наполнитель
A	кофеин, вещество из группы меторфанов, димедрол, ацетаминофен	5-гидроксиметилфурфурол, меконин, гидроксикотарнин, носкапин, папаверин, морфин, кодеин	сахароза
B	кофеин, вещество из группы меторфанов, димедрол, ацетаминофен	фенобарбитал, 5-гидроксиметилфурфурол, меконин, гидроксикотарнин, носкапин, папаверин, морфин, кодеин, метадон	сахароза
C	кофеин, вещество из группы меторфанов, димедрол, ацетаминофен	лидокаин, фенобарбитал, 5-гидроксиметилфурфурол, меконин, гидроксикотарнин, носкапин, папаверин, морфин, кодеин	глюкоза
D, E	кофеин	5-гидроксиметилфурфурол, меконин, гидроксикотарнин, носкапин, папаверин, морфин, кодеин	сахароза

Исследование методом ИК-спектроскопии. ИК-спектры образцов регистрировали после гомогенизирования путем перетирания в агатовой ступке. Для регистрации ИК-спектров использовали ИК-Фурье-спектрометр Nicolet 380 фирмы Thermo Scientific при следующих условиях: диапазон волновых чисел – 4000–700 см⁻¹; число сканирований – 10; разрешение – 4 см⁻¹; автокоррекция атмосферы (вода и CO₂). Спектры отражения регистрировали с использованием приставки нарушенного полного внутреннего отражения НПВО (ATR) с кристаллом германия. Глубина проникновения ИК-излучения в образец зависит от показателя преломления материала кристалла и обычно не превышает нескольких микрон, поэтому использование приставки позволяет исключить влияние количества исследуемого объекта (длину пути). Кроме того, использование приставки позволяет сократить время получения спектра одного объекта, так как отсутствуют временные затраты на приготовление таблеток с бромидом калия. Важно отметить, что сбор данных при записи спектров образцов из различных источников проводили в произвольном порядке, спектр фона записывали перед каждой регистрацией ИК-спектра пробы.

Исследование методом хромато-масс-спектрометрии. Для анализа использовали метанольные растворы веществ. Для этого к перетертым навескам веществ массой по 100 мг добавляли по 1 мл метанола (99,9 %, Panreac), смеси выдерживали при комнатной температуре в течение 30

минут с постоянным перемешиванием. После этого растворы центрифугировали при 13000 об./мин., декантировали и анализировали. Анализ проводили с использованием газового хроматографа модели 6890N с масс-селективным детектором модели 5973 фирмы Agilent Technologies при следующих условиях: колонка – кварцевая капиллярная HP-5MS (30 м x 0,25 мм x 0,25 мкм); температура испарителя – 280 °С, температура источника – 230 °С; газ-носитель – гелий, скорость газа-носителя – 1 мл/мин.; объем вводимой пробы – 1,0 мкл. Пробы вводили с делением потока 1 : 40. Ввод проб осуществляли с помощью автоматического дозатора. Масс-селективный детектор работал в режиме электронного удара (70 эВ) с регистрацией масс с 35 по 450 а. е. м. Скорость сканирования – 3,46 сканов в секунду, порог интенсивности составлял 150. Анализ проводили в режиме регистрации по полному ионному току (TIC). Сбор и обработку данных проводили с помощью программного обеспечения MSD ChemStation. В качестве анализируемого массива данных был выбран средний масс-спектр объекта в интервале времен удерживания, содержащем основные компоненты, выявленные на хроматограмме.

Хемометрическая обработка данных ИК-спектроскопии и хромато-масс-спектрометрии. Для математической обработки ИК-спектров использовали программное обеспечение TQ Analyst фирмы Thermo Scientific. Из предлагаемых программой классификационных методов обработки спектров использовали метод дис-

криминантного анализа. Согласно данным производителя продукта, принцип работы данного метода аналогичен методу, известному под названием SIMCA (Soft Independent Modeling of Class Analogies). Правильность разделения стандартов на классы проверяли с использованием диагностической процедуры Principal Component Scores (PC Scores).

Набор данных, полученных методом ИК-спектроскопии, использовали напрямую, т. е. в таблице стандартов сохраняли записанные ИК-спектры объектов. Данные, полученные методом хромато-масс-спектрометрии, вводили в таблицу стандартов в виде усредненных масс-спектров.

Результаты и обсуждение

На рисунке 1 показан график счетов PC1-PC2 для образцов героина из источников А, В, С, D, E по результатам обработки ИК-спектров.

На рисунке 2 приведен график счетов PC1-PC2 для образцов героина (по 20 из каждого источника) из этих же источников по результатам обра-

ботки хромато-масс-спектрометрических данных.

На рисунках видно, что результаты хемометрической обработки ИК-спектров и средних масс-спектров в выбранном диапазоне хроматограмм образцов героина позволили разделить исследуемые объекты на 4 группы, причем результаты обработки данных двух не коррелируемых друг с другом методов анализа (ИК-спектроскопии и хромато-масс-спектрометрии) совпали. При этом образцы D и E составили одну группу, что совпадает с результатами сравнительного анализа, проведенного по более трудоемкой и затратной по времени методике [1].

Заключение

Таким образом, в результате проведенных исследований установлено, что хемометрический (дискриминантный) метод при анализе ИК-спектров в средней ИК-области и при анализе результатов хромато-масс-спектрометрии образцов героина позволил разделить исследуемые образцы героина на классы и отнести их к разным (или од-

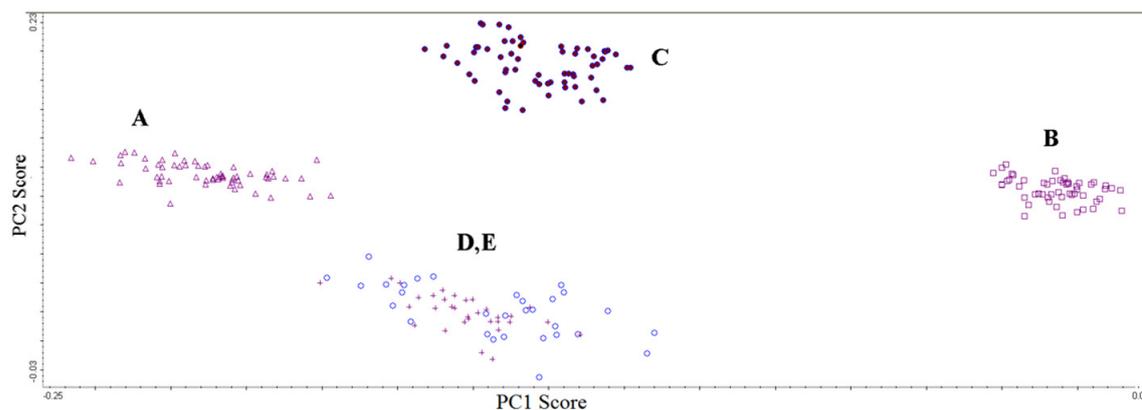


Рис. 1. График счетов (PC1-PC2) для объектов А, В, С, D, E (по данным ИК-спектроскопии)
Fig. 1. Chart of accounts (PC1-PC2) for objects A, B, C, D, E (according to IR spectroscopy data)

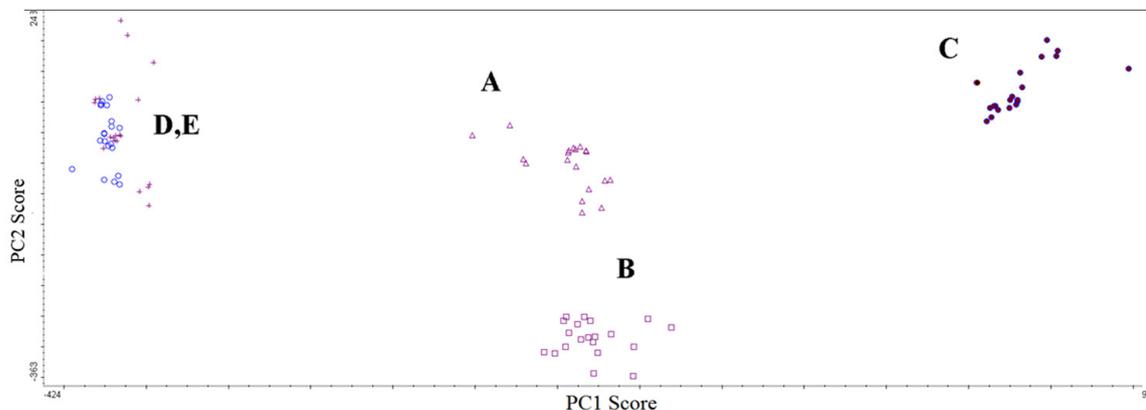


Рис. 2. График счетов (PC1-PC2) для объектов А, В, С, D, E (по данным хромато-масс-спектрометрии)
Fig. 2. Chart of accounts (PC1-PC2) for objects A, B, C, D, E (according to chromatography-mass spectrometry data)

ному) источникам изъятия. При этом сокращается время получения результата в сопоставлении с существующими методами [1–3], процесс сравнения нагляден и автоматизирован, что немаловажно при сравнительном исследовании большого количества объектов и ведении соответствующего

экспертно-криминалистического учета. Результаты, полученные путем хемометрической обработки данных двух не коррелируемых друг с другом методов анализа (ИК-спектроскопии и хромато-масс-спектрометрии), совпали.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сорокин В.И., Орлова О.С., Любецкий Г.В. Установление общности источника происхождения героина. Методические рекомендации. М.: ЭКЦ МВД России, 2002. 80 с.
2. Завьялова А.А., Завьялов В.В., Гладырев В.В., Любецкий Г.В., Багров А.Д. Методические основы установления общего источника происхождения синтетических наркотических средств и психотропных веществ. Методические рекомендации. М.: ЭКЦ МВД России, 2013. 104 с.
3. Щербakov С.Ю., Сарычев И.И., Сыромятников С.В. Сравнительное исследование наркотических средств, входящих в группу амфетамина, на предмет установления источника происхождения. Методические рекомендации. М.: ЭКУ 9 Департамента ФСКН России, 2006. 21 с.
4. Елизарова Т.Е., Плетнева Т.В. Хемометрический анализ ИК-спектров в ближнем диапазоне при оценке подлинности лекарственных средств // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Медицина. 2008. № 7. С. 165–167.
5. Бальклова К.С., Садчикова Н.П., Арзамасцев А.П., Титова А.В. Использование метода ближней инфракрасной спектроскопии в анализе субстанций и таблеток сульфалена // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация. 2009. № 1. С. 97–100.
6. Бурашникова М.М., Курчаткин С.П., Монахова Ю.Б., Муштакова С.П., Цикин А.М. Метод главных компонент в экспертизе лакокрасочных покрытий // Судебная экспертиза. 2014. № 2 (38). С. 95–106.
7. Лобачев А.Л., Фомина Н.В., Монахова Ю.Б. Идентификация нефтей Самарской области с использованием метода главных компонент и факторного дискриминантного анализа // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Химия. Биология. Экология. 2015. Т. 15. Вып. 1. С. 23–27.
8. Болотник Т.А., Тимченко Ю.В., Плющенко И.В., Левкина В.В., Пирогов А.В., Смоленков А.Д., Попик М.В., Шпигун О.А. Применение хемометрических методов анализа данных для идентификации и типизации нефтей и нефтепродуктов // Масс-спектрометрия. 2018. Т. 15. № 3. С. 203–208. <http://doi.org/10.25703/MS.2018.15.36>

REFERENCES

1. Sorokin V.I., Orlova O.S., Lyubetsky G.V. *Establishing a Common Source of Origin for Heroin. Methodical Recommendation*. Moscow: EKTs Ministry of Internal Affairs of Russia, 2002. 80 p. (In Russ.).
2. Zav'yalova A.A., Zav'yalov V.V., Gladyshev V.V., Lyubetskii G.V., Bagrov A.D. *Methodical Foundations for Establishing the Common Source of Origin of Synthetic Narcotic Drugs and Psychotropic Substances. Methodical Recommendations*. Moscow: EKTs Ministry of Internal Affairs of Russia, 2013. 104 p. (In Russ.).
3. Shcherbakov S.Yu., Sarychev I.I., Syromyatnikov S.V. *Comparative Study of Drugs Included in the Amphetamine Group to Establish the Source of Origin. Methodical Recommendations*. Moscow: ECU 9 Department of the Federal Drug Control Service of Russia, 2006. 21 p. (In Russ.).
4. Elizarova T.E., Pletneva T.V. Chemometric Analysis at Near/Infrared Spectrophotometry Identification of Pharmaceutical Substances and Preparations. *RUDN Journal of Medicine*. 2008. No. 7. P. 165–167. (In Russ.).
5. Balyiklova K.S., Sadchikova N.P., Arzamastzev A.P., Titova A.V. Using Near IR-Spectroscopy for Analysis of Sulfalen and Its Dosage Forms. *Proceedings of Voronezh State University. Chemistry. Biology. Pharmacy*. 2009. No. 1. P. 97–100. (In Russ.).
6. Burashnikova M.M., Kurchatkin S.P., Monakhova Yu.B., Mushtakova S.P., Tsikin A.M. Principal Component Analysis in Paint Coatings Expertise. *Forensic Examination*. 2014. No. 2 (38). P. 95–106. (In Russ.).
7. Lobachev A.L., Fomina N.V., Monakhova Yu.B. Identification of the Samara Region's Oil Products Using the Method of Principal Components and Factor Discriminant Analysis. *Izvestiya of Saratov University. New Series. Series: Chemistry. Biology. Ecology*. 2015. Vol. 15. Issue 1. P. 23–27. (In Russ.).
8. Bolotnik T.A., Timchenko Yu.V., Plushchenko I.V., Levkina V.V., Pirogov A.V., Smolenkov A.D., Popik M.V., Shpigun O.A. The Use of Chemometric Methods of Data Analysis for the Identification and Typification of Petroleum and Petroleum Products. *Mass Spectrometry*. 2018. Vol. 15. No. 3. P. 203–208. (In Russ.). <http://doi.org/10.25703/MS.2018.15.36>

9. Silve C.S., Pimemtel M.F., Amigo J.M., Garcia-Ruiz C., Ortega-Ojeda F. Chemometric Approaches for Document Dating: Handling Paper Variability // *Analytica Chimica Acta*. 2018. Vol. 1031. P. 28–37.
<http://doi.org/10.1016/j.aca.2018.06.031>
10. Монахова Ю.Б., Муштакова С.П. Математическая обработка спектров при анализе смесей методом независимых компонент: идентификация и количественный анализ // *Журнал аналитической химии*. 2012. Т. 67. № 12. С. 1044–1051.
11. Монахова Ю.Б., Цикин А.М., Муштакова С.П. Обработка ЯМР-, УФ- и ИК-спектрометрических данных перед хемометрическим моделированием методами независимых и главных компонент // *Журнал аналитической химии*. 2016. Т. 71. № 6. С. 582–588.
<http://doi.org/10.7868/S0044450216060128>
12. Maione C., de Oliveira Souza V.C., Togni L.R., da Costa J.L., Campiglia A.D., Barbosa F., Barbosa R.M. Using Cluster Analysis and ICP-MS to Identify Groups of Ecstasy Tablets in Sao Paulo State, Brazil // *Journal of Forensic Sciences*. 2017. Vol. 62. P. 1479–1486.
<https://doi.org/10.1111/1556-4029.13448>
13. Eliaerts J., Dardenne P., Meert N., van Durme F., Samyn N., Janssens K., De Wael K. Rapid Classification of Cocaine in Seized Powders with ATR-FTIR and Chemometrics // *Drug Testing and Analysis*. 2017. Vol. 9. No. 10. P. 1480–1489. <https://doi.org/10.1002/dta.2149>
14. Mariotti K.C., Marcelo M.C.A., Ortiz R.S., Borille B.T., Reis M., Fett M.S., Ferrao M.F., Limberger R.P. Seized Cannabis Seeds Cultivated in Greenhouse: A Chemical Study by Gas Chromatography-Mass Spectrometry and Chemometric Analysis // *Science & Justice*. 2016. Vol. 56. No. 1. P. 35–41.
<https://doi.org/10.1016/j.scijus.2015.09.002>
15. Kumar R., Sharma V. Chemometrics in Forensic Science // *Trends in Analytical Chemistry*. 2018. Vol. 105. P. 191–201.
<https://doi.org/10.1016/j.trac.2018.05/010>
16. Bovens M., Ahrens B., Alberink I., Nordgaard A., Salonen T., Huhtala S. Chemometrics in Forensic Chemistry – Part I: Implications to the Forensic Workflow // *Forensic Science International*. 2019. Vol. 301. P. 82–90.
<https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2019.05/030>
9. Silve C.S., Pimemtel M.F., Amigo J.M., Garcia-Ruiz C., Ortega-Ojeda F. Chemometric Approaches for Document Dating: Handling Paper Variability. *Analytica Chimica Acta*. 2018. Vol. 1031. P. 28–37.
<http://doi.org/10.1016/j.aca.2018.06.031>
10. Monakhova Yu.B., Mushtakova S.P. Mathematical Processing of Spectra in the Analysis of Mixtures by the Method of Independent Components: Identification and Quantitative Analysis. *Journal of Analytical Chemistry*. 2012. Vol. 67. No. 12. P. 1044–1051. (In Russ.).
11. Monakhova Yu.B., Tsikin A.M., Mushtakova S.P. Processing of NMR, UV, and IR Spectrometric Data Prior to Chemometric Simulation by Independent Component and Principal Component Analysis. *Journal of Analytical Chemistry*. 2016. Vol. 71. No. 6. P. 582–588. (In Russ.).
<http://doi.org/10.7868/S0044450216060128>
12. Maione C., de Oliveira Souza V.C., Togni L.R., da Costa J.L., Campiglia A.D., Barbosa F., Barbosa R.M. Using Cluster Analysis and ICP-MS to Identify Groups of Ecstasy Tablets in Sao Paulo State, Brazil. *Journal of Forensic Sciences*. 2017. Vol. 62. P. 1479–1486.
<https://doi.org/10.1111/1556-4029.13448>
13. Eliaerts J., Dardenne P., Meert N., van Durme F., Samyn N., Janssens K., De Wael K. Rapid Classification of Cocaine in Seized Powders with ATR-FTIR and Chemometrics. *Drug Testing and Analysis*. 2017. Vol. 9. No. 10. P. 1480–1489. <https://doi.org/10.1002/dta.2149>
14. Mariotti K.C., Marcelo M.C.A., Ortiz R.S., Borille B.T., Reis M., Fett M.S., Ferrao M.F., Limberger R.P. Seized Cannabis Seeds Cultivated in Greenhouse: A Chemical Study by Gas Chromatography-Mass Spectrometry and Chemometric Analysis. *Science & Justice*. 2016. Vol. 56. No. 1. P. 35–41.
<https://doi.org/10.1016/j.scijus.2015.09.002>
15. Kumar R., Sharma V. Chemometrics in Forensic Science // *Trends in Analytical Chemistry*. 2018. Vol. 105. P. 191–201.
<https://doi.org/10.1016/j.trac.2018.05/010>
16. Bovens M., Ahrens B., Alberink I., Nordgaard A., Salonen T., Huhtala S. Chemometrics in Forensic Chemistry – Part I: Implications to the Forensic Workflow. *Forensic Science International*. 2019. Vol. 301. P. 82–90.
<https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2019.05/030>

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Модинава Лариса Ивановна – к. х. н., заместитель начальника отдела криминалистических экспертиз материалов, веществ, изделий Экспертно-криминалистического центра Главного управления Министерства внутренних дел Российской Федерации по Нижегородской области; e-mail: larisamodinova@yandex.ru

ABOUT THE AUTHORS

Modinova Larisa Ivanovna – Candidate of Chemistry, Deputy Head of Department of Forensic Examinations of Materials, Substances, Products, Forensic Center of the Main Department of the Ministry of Internal Affairs of the Russian Federation in the Nizhny Novgorod region; e-mail: larisamodinova@yandex.ru

Щербаков Николай Алексеевич – начальник отделения специальных экспертиз отдела криминалистических экспертиз материалов, веществ, изделий Экспертно-криминалистического центра Главного управления Министерства внутренних дел Российской Федерации по Нижегородской области;
e-mail: nshcherbakov8@mvd.ru

Статья поступила: 19.01.2021

После доработки: 10.02.2021

Принята к печати: 25.02.2021

Shcherbakov Nikolai Alekseevich – Section Chief of Department of Forensic Examinations of Materials, Substances, Products, Forensic Center of the Main Department of the Ministry of Internal Affairs of the Russian Federation in the Nizhny Novgorod region; e-mail: nshcherbakov8@mvd.ru

Received: January 19, 2021

Revised: February 10, 2021

Accepted: February 25, 2021