

Редкие и новые психоактивные соединения

(Московская область, 2015-2018 гг):

обнаружение методом ЖХ-МСп и

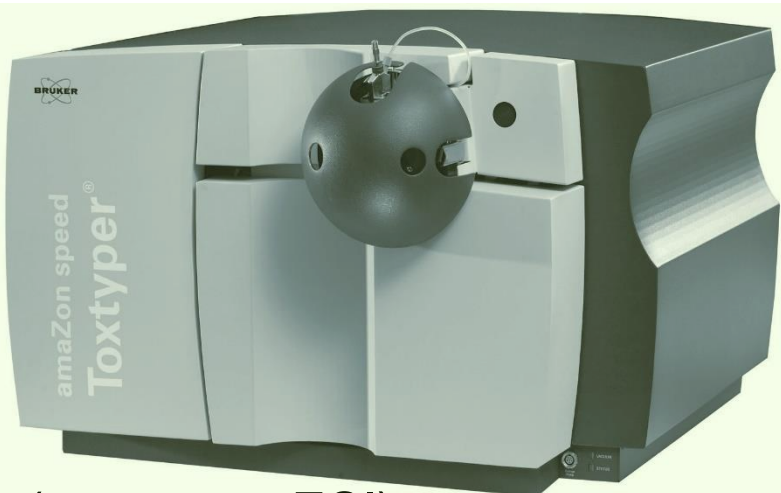
структурная идентификация

метаболитов

Григорьев А.М.

*ГБУЗ Московской области «Бюро судебно-медицинской
экспертизы*

amaZon Speed ITrap (Bruker)



(источник ESI)

скрининг + MC^n

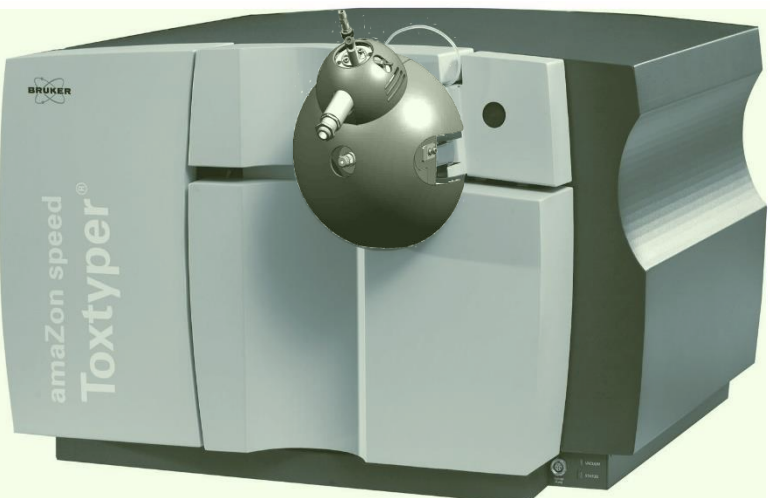
$MC^1 - MC^3$

поиск и подтверждение

$MC^1 - MC^2$
(точная масса)



6520 QTOF (Agilent)



(подогреваемый источник IonBuster)





- безгидролизная схема (обнаружение метаболитов фазы I и II);
- ориентация на жидкости.



+ 10% ацетонитрила

прямой ввод

извлечение ацетонитрилом

100 мкл × 1

100 мкл × 1

высаливание (NaHCO₃) двойная экстракция

1000 мкл × 10

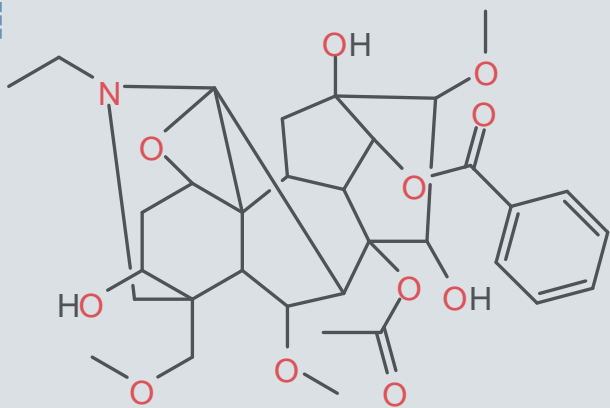
1000 мкл × 10

1000 мкл × 10

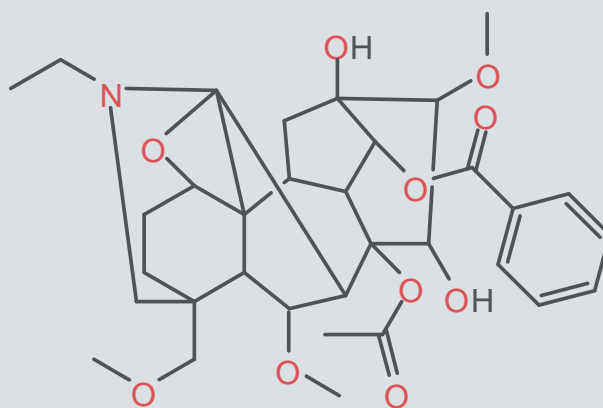
закисление экстракция этилацетатом

1000 мкл + HCl × 10

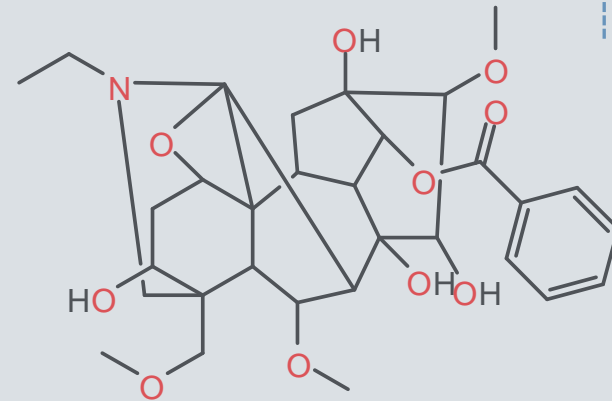
группа *Aconitum*



Аконитин

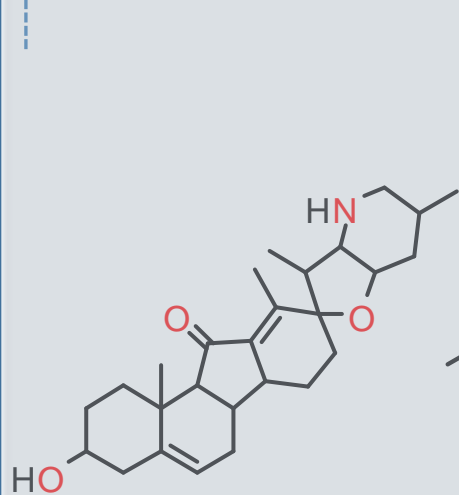


Дезоксиаконитин

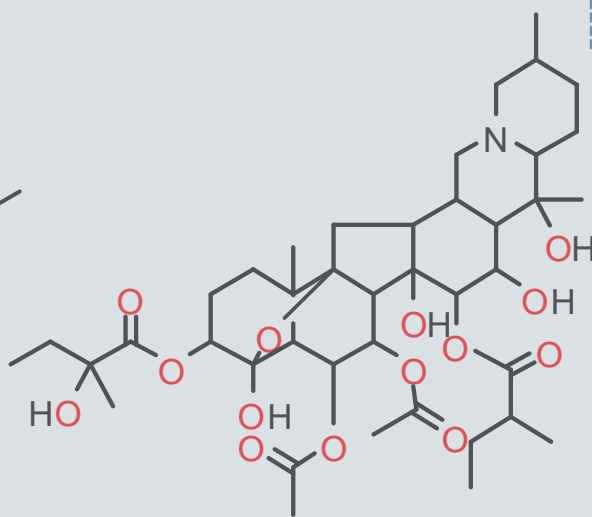


Бензоилаконитин

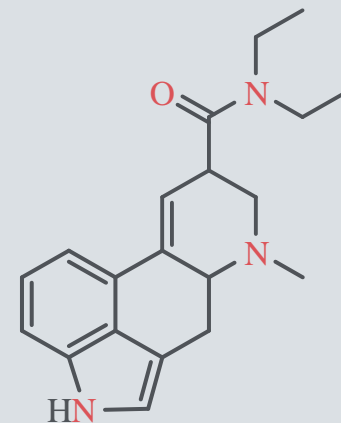
группа *Veratrum*



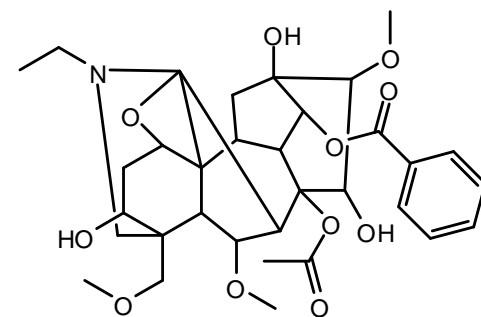
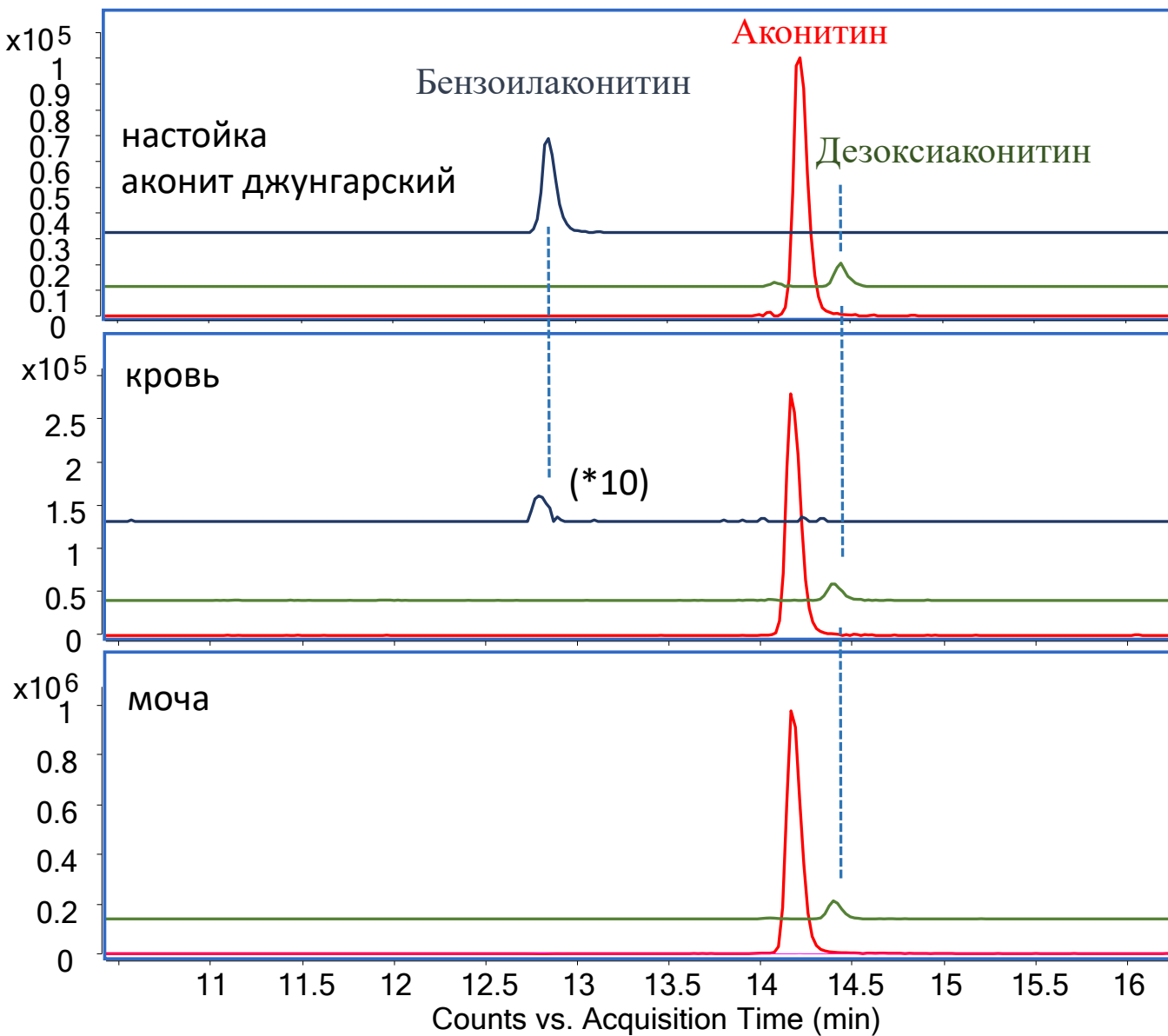
Иервин



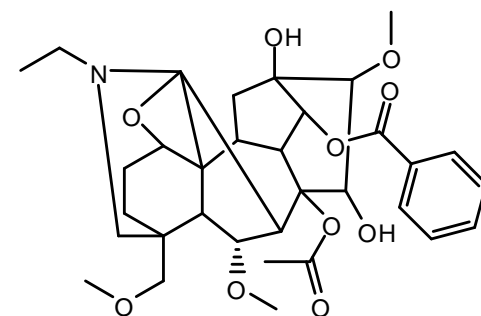
Протовератрин А



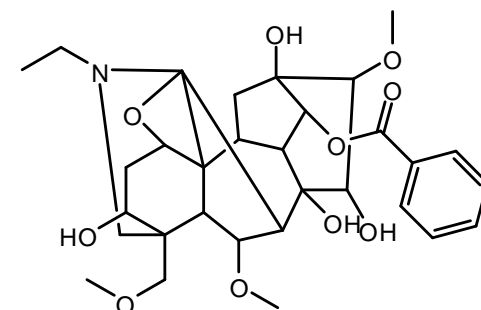
LSD



Аконитин m/z 646.322

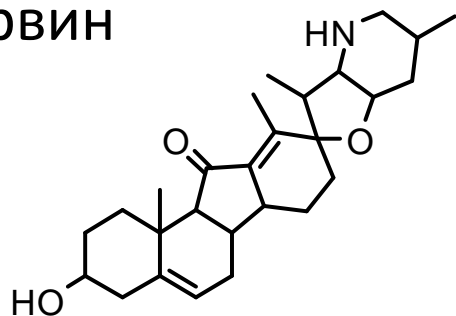


Дезоксиаконитин m/z 630.327

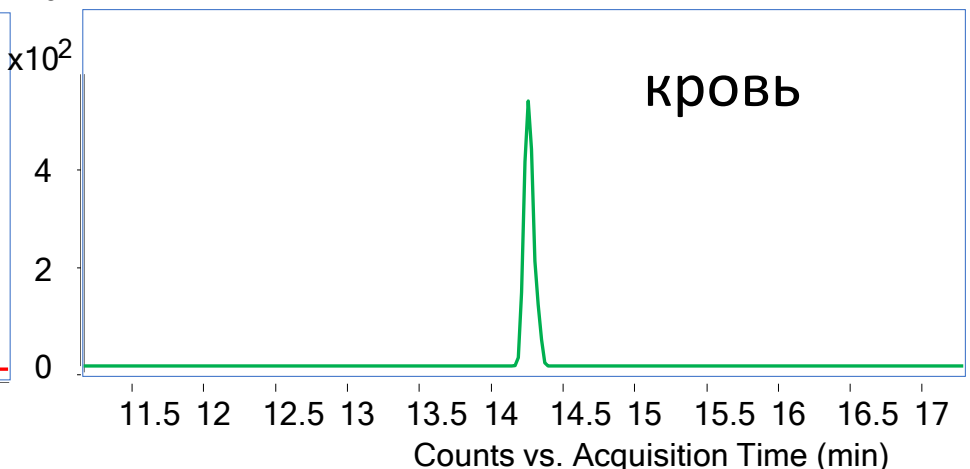
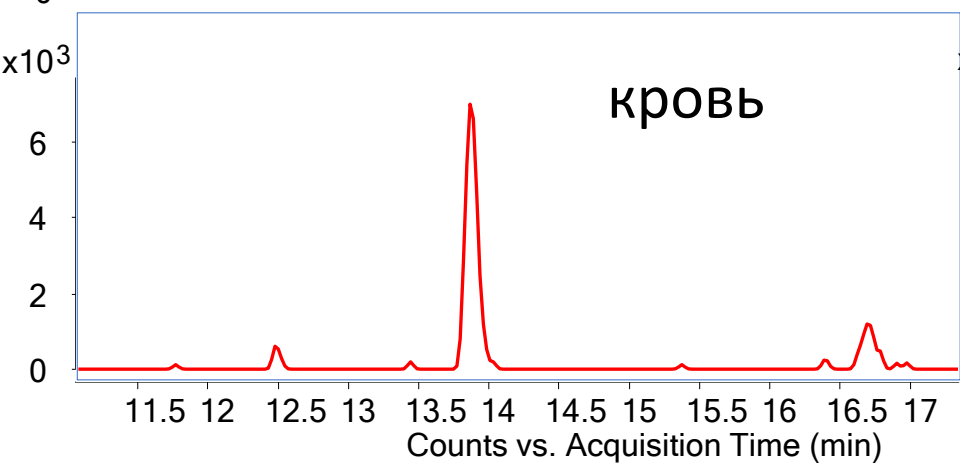
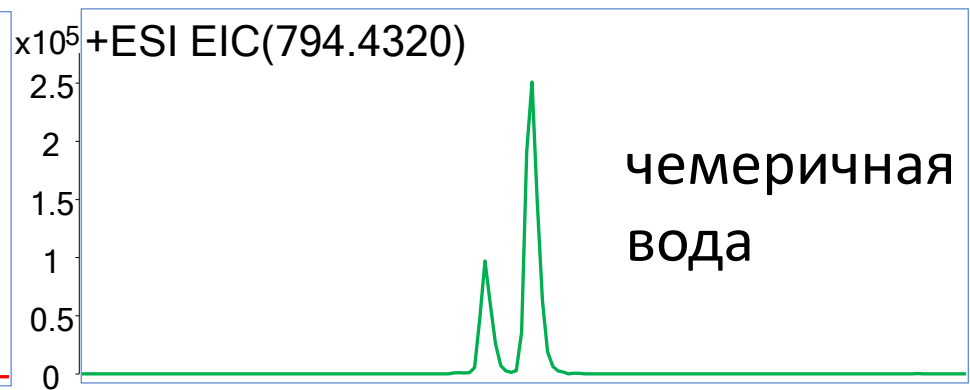
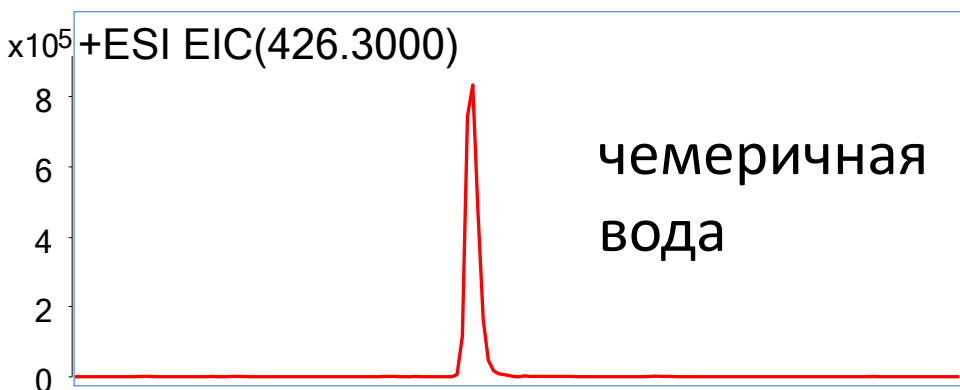
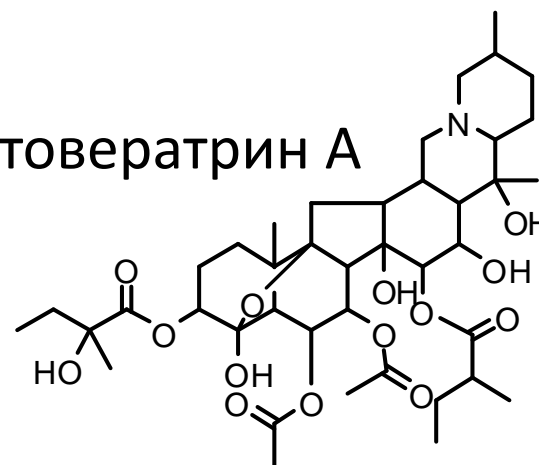


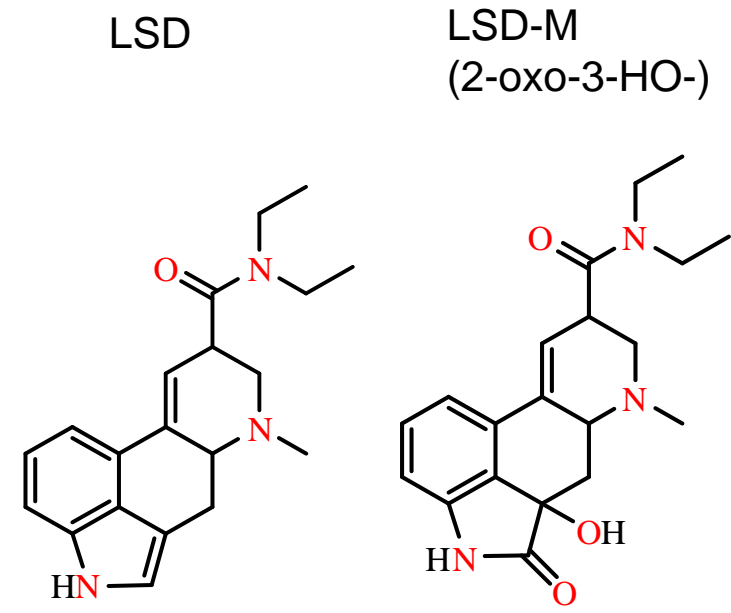
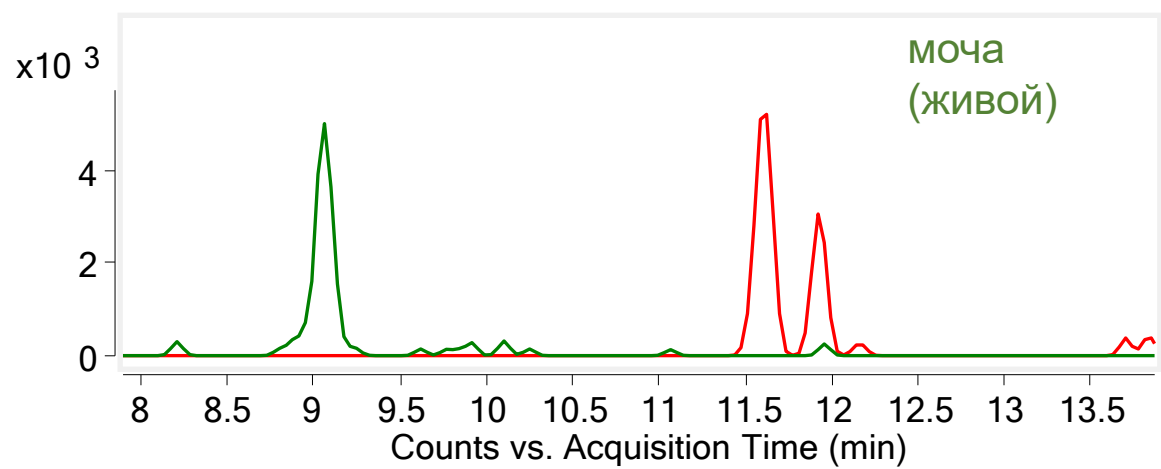
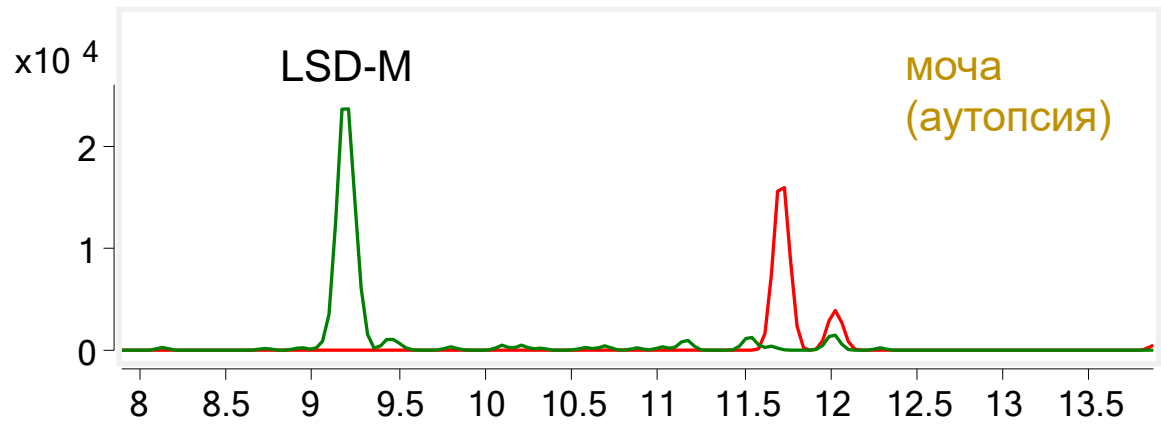
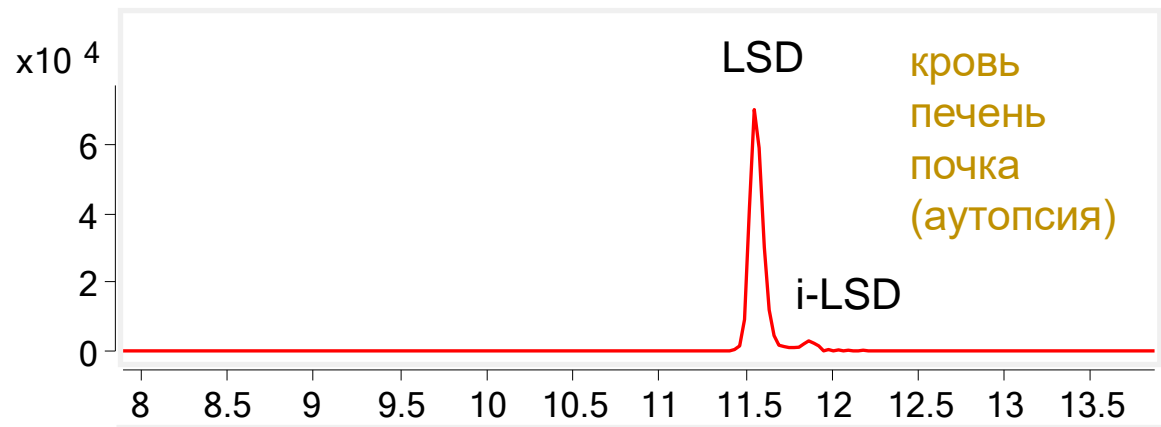
Бензоилаконитин m/z 604.312

Иервин

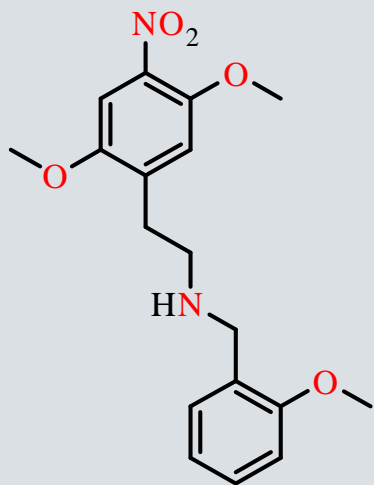


Протовератрин А

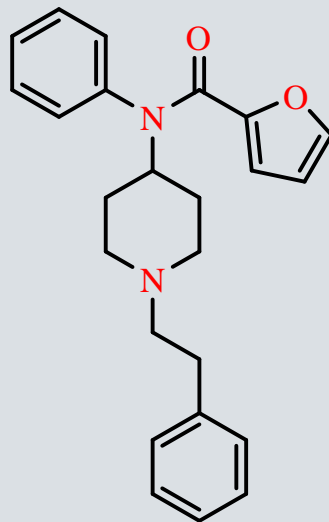




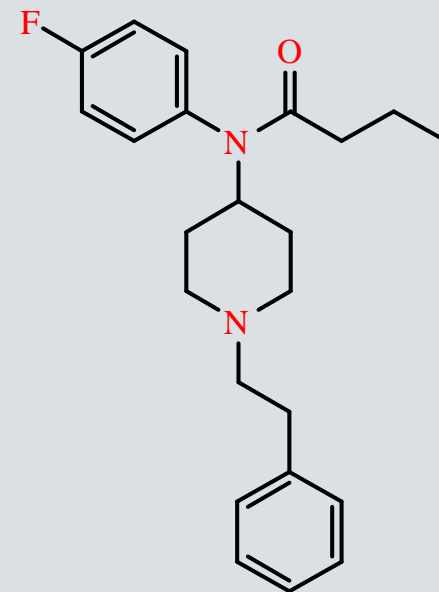
№	Объект	LSD	LSD (M)
1	кровь	+	-
	печень	+	-
	почка	+	-
2	кровь	+	-
	моча	+	+
1	моча	-	+
2	моча	+	+



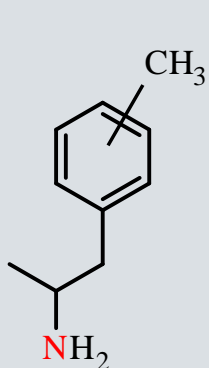
25N-NBOMe



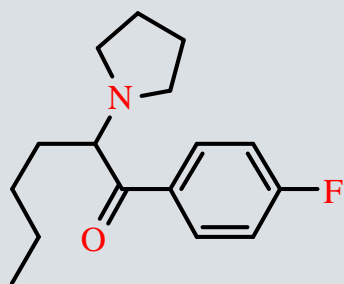
Фуранилфентанил



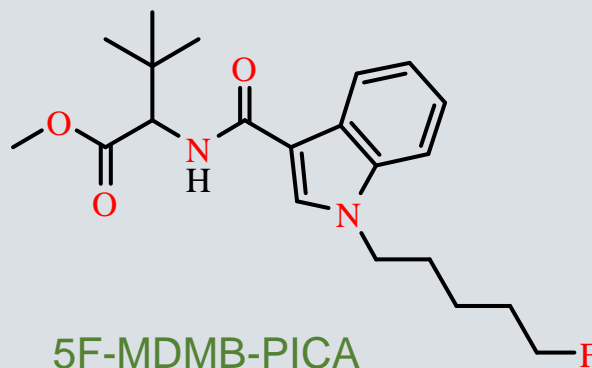
p-Фторбутирилфентанил



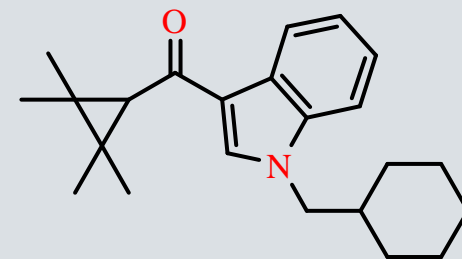
n-Метиламфетамин



4F-PHP



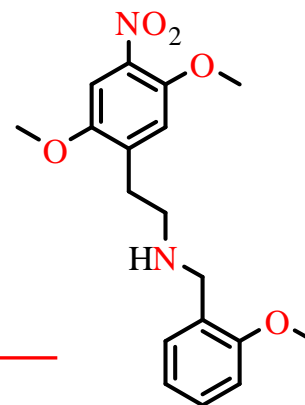
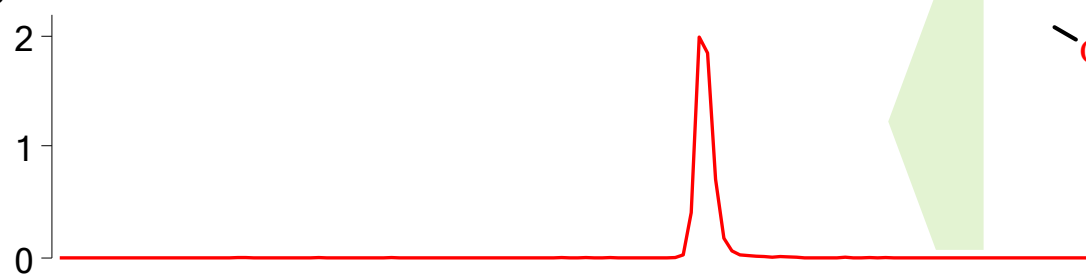
5F-MDMB-PICA



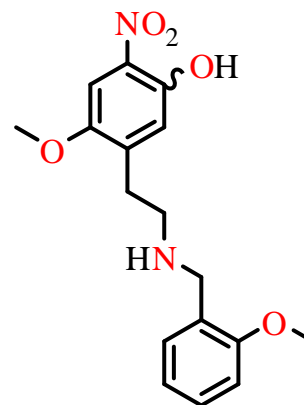
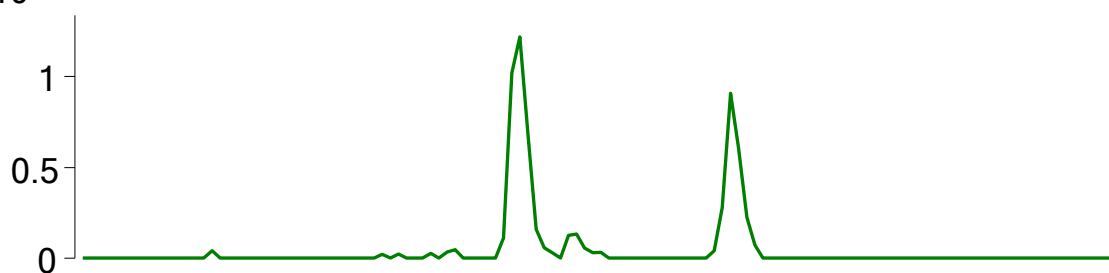
TMCP-CHMINACA

Соавторы:
О.Л. Заикина
А.В. Смирнов

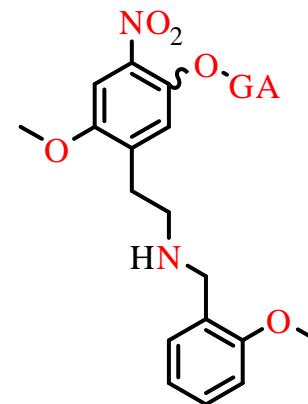
x10⁵ +ESI EIC(347.1600)



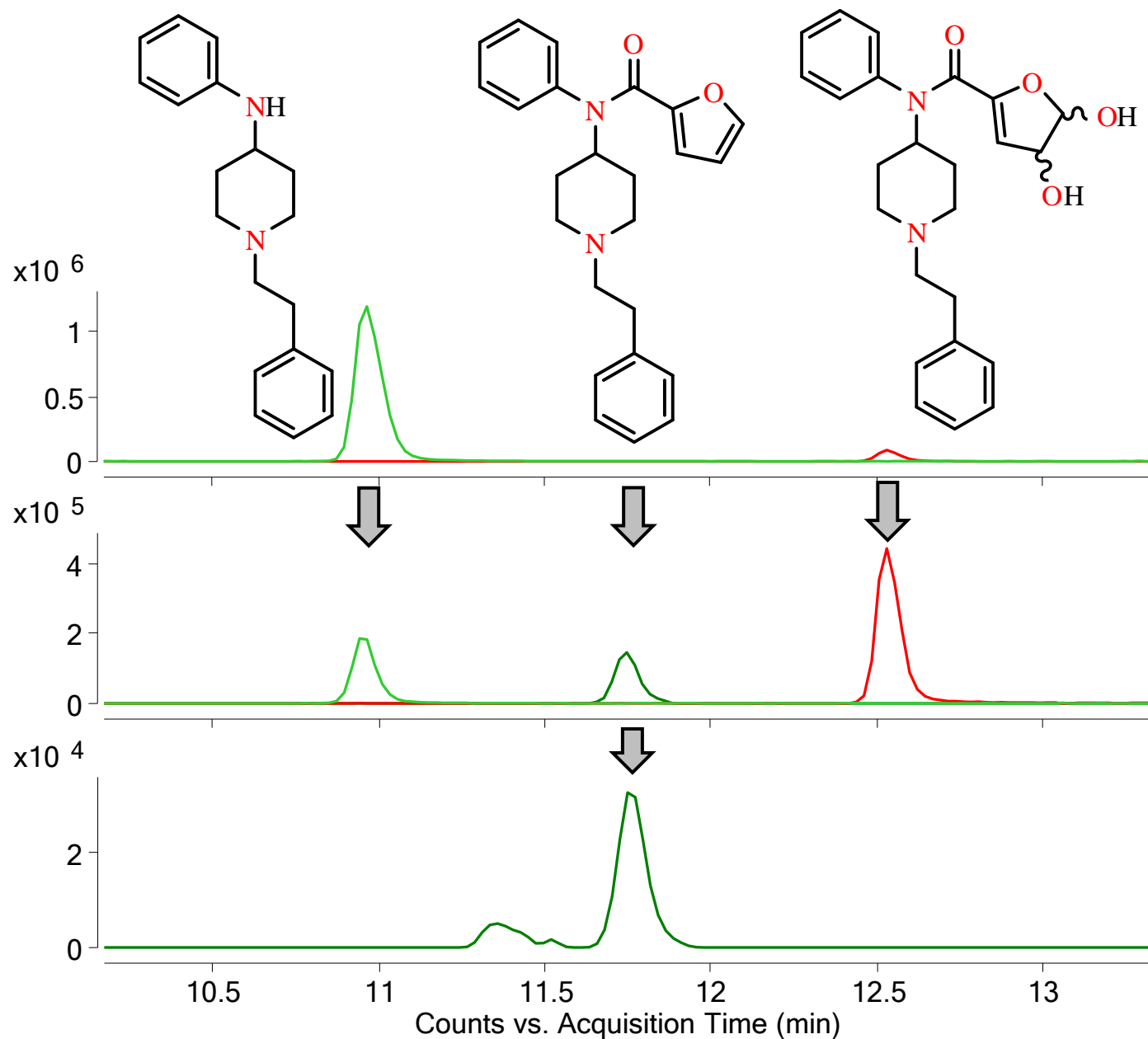
x10⁴ +ESI EIC(333.1440)



x10⁴ +ESI EIC(509.1770)



Counts vs. Acquisition Time (min)



Соавторы:

Е.В. Никитин

В.А. Калашиников

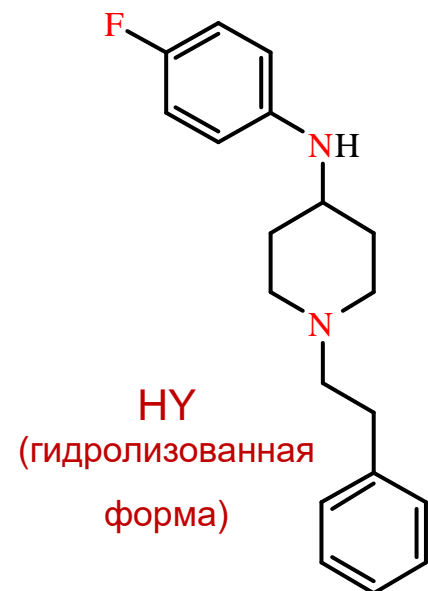
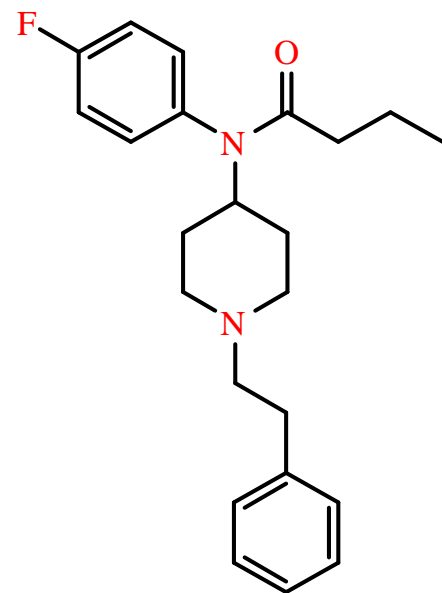
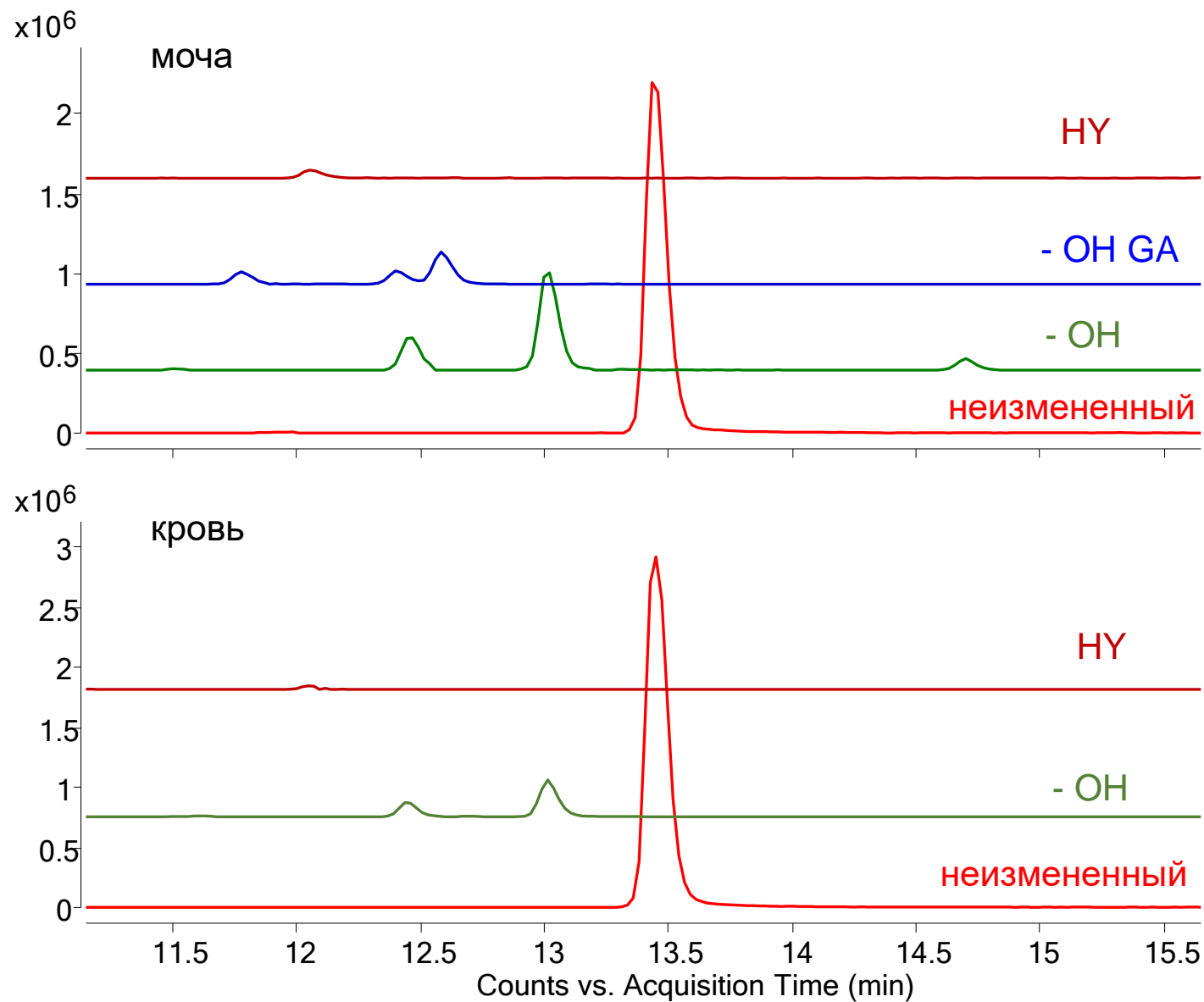
С.Е. Грибкова

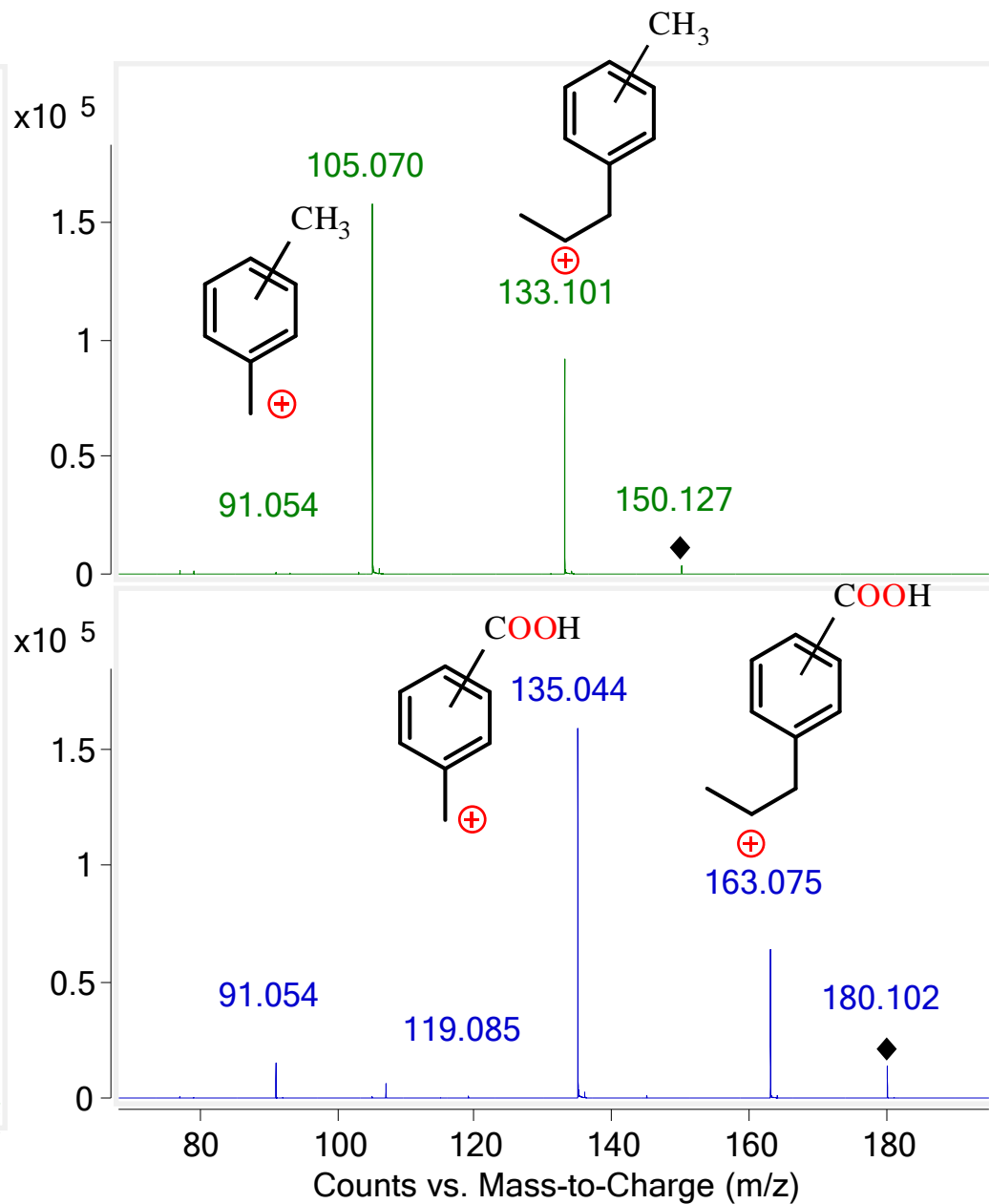
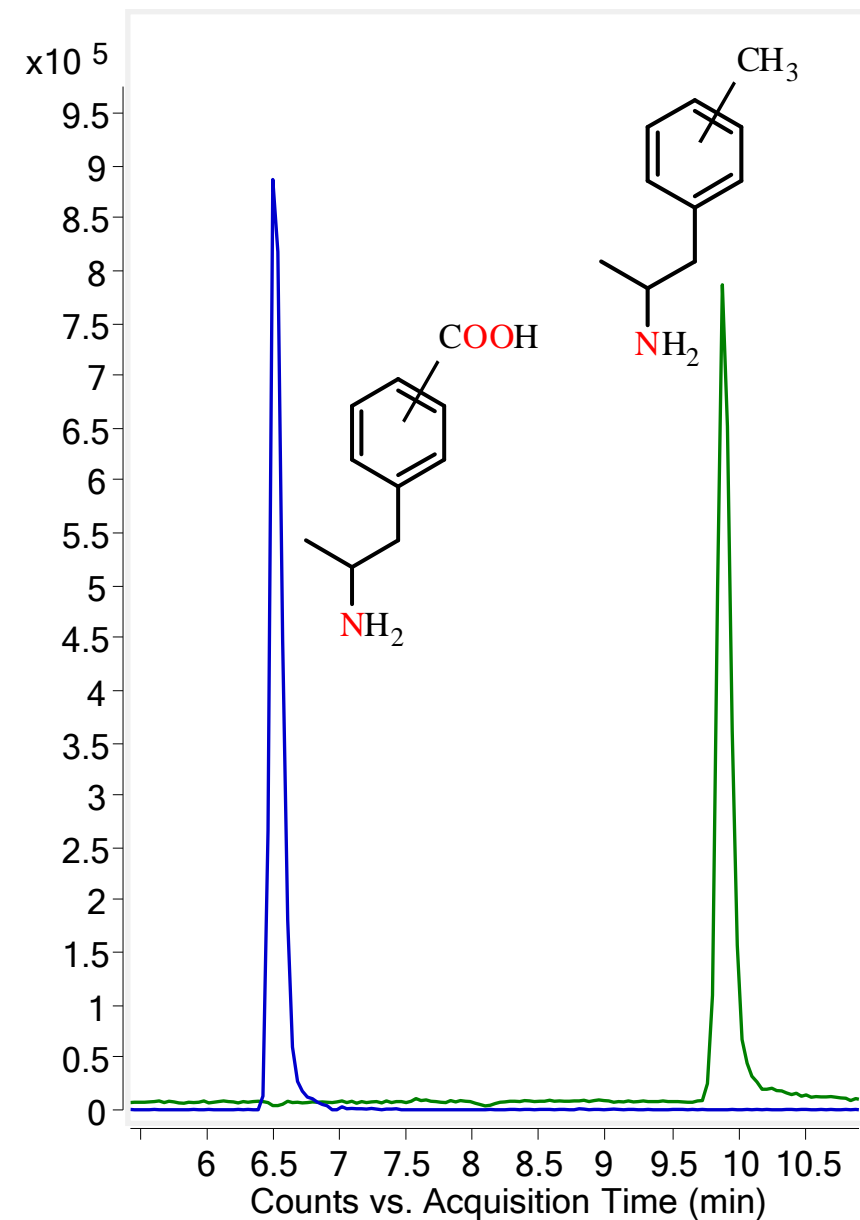
моча, крыса

моча, человек
(аутопсия, +PVP)

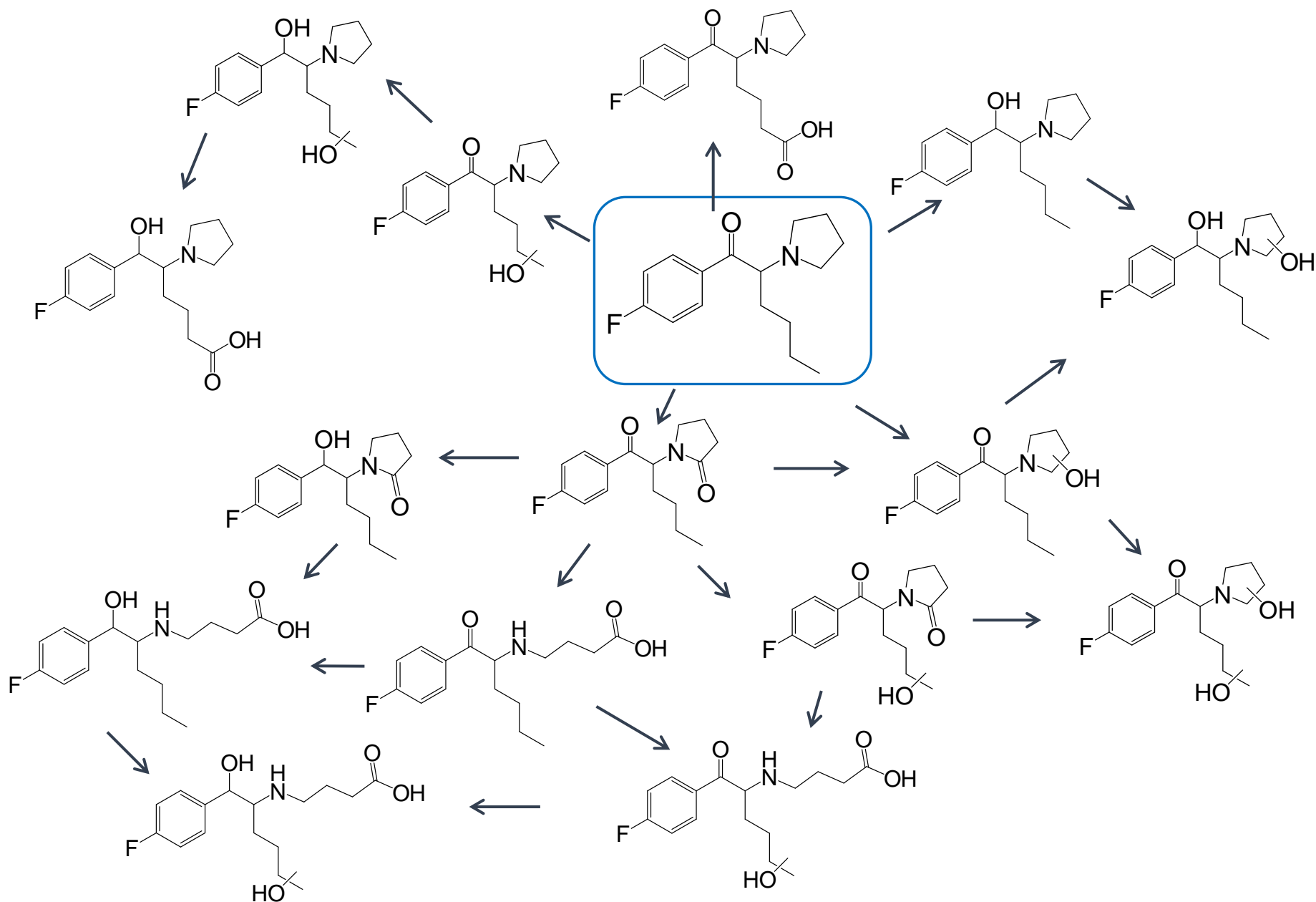
кровь, человек
(аутопсия, +PVP)

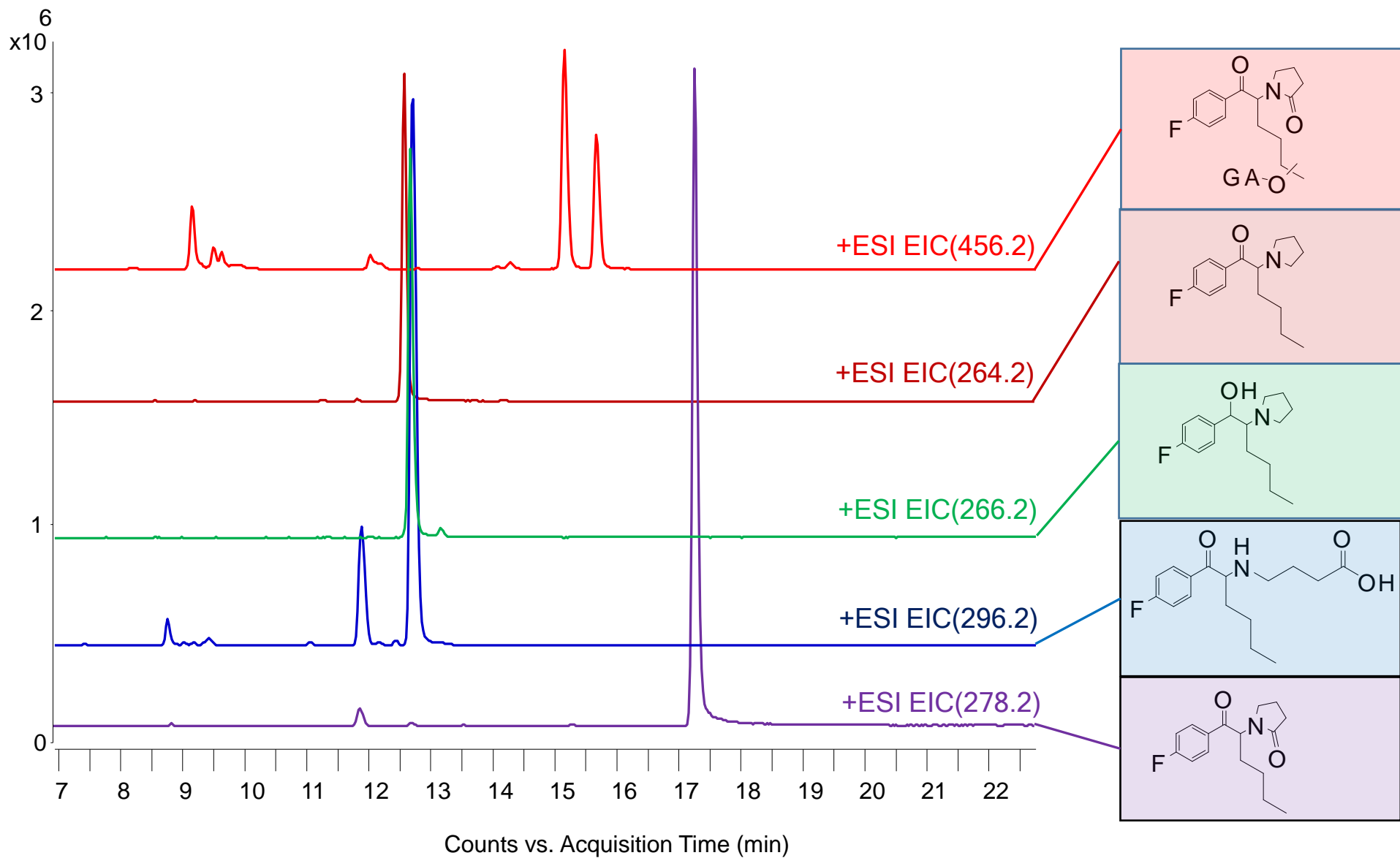
р-Фторбутирилфентанил и метаболиты в моче и крови
(LC-QTOF, ± 5 мДа)





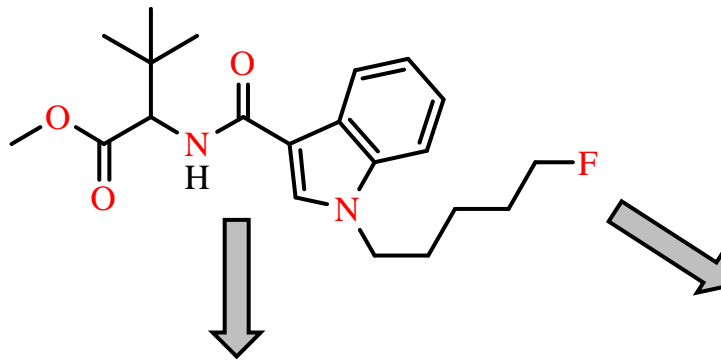
(почти для всех соединений обнаружены глюкуронидированные формы)



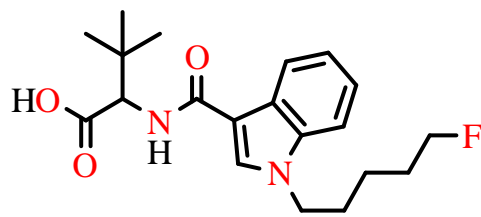


(гидролизованная группа)

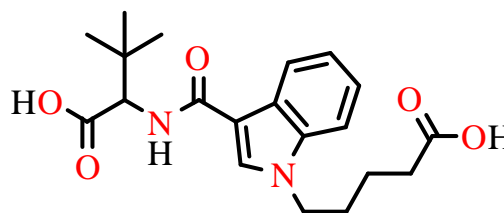
Всего ~ 40 соединений
(свободные формы + глюкурониды)



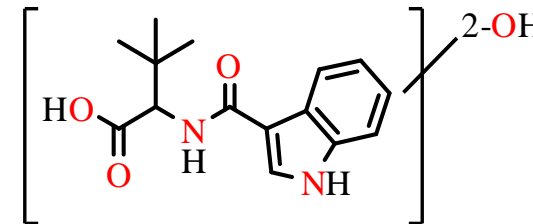
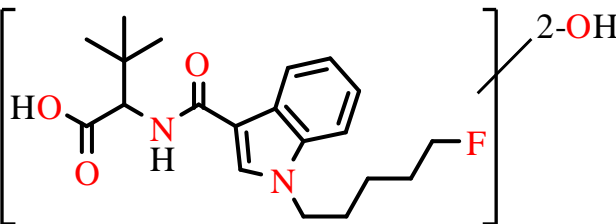
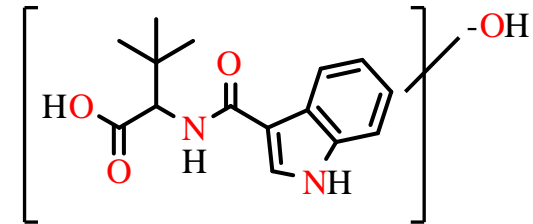
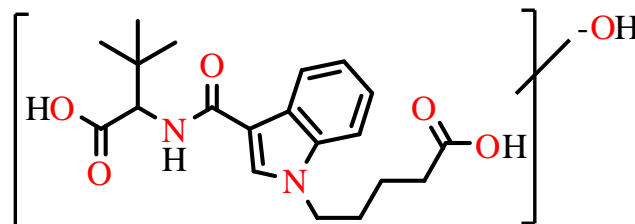
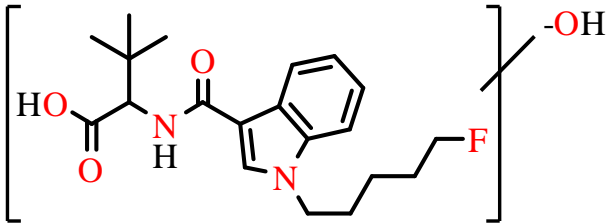
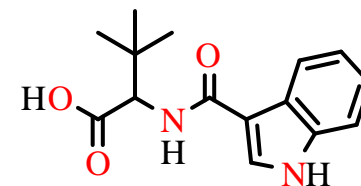
гидроксилирование



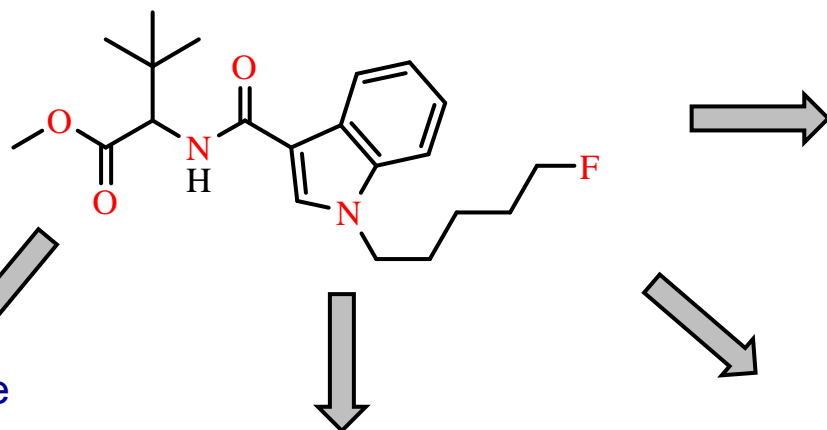
дефторирование + гидроксилирование



деалкилирование (I) + гидроксилирование



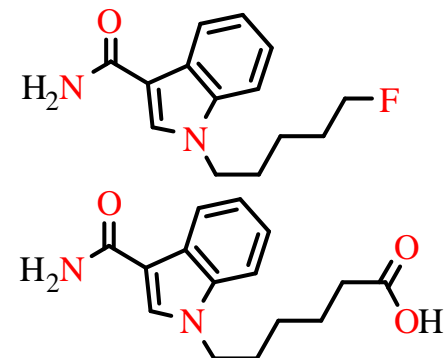
(негидролизованная группа)



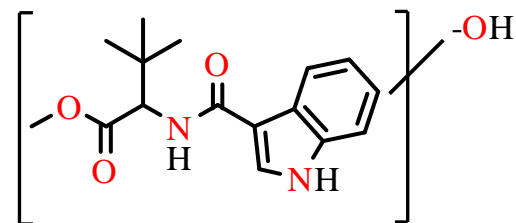
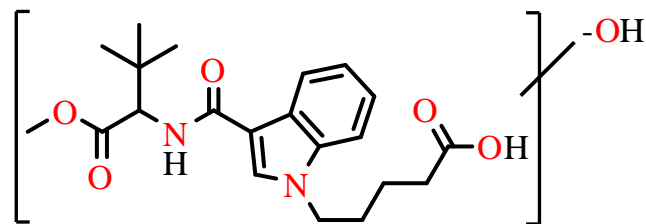
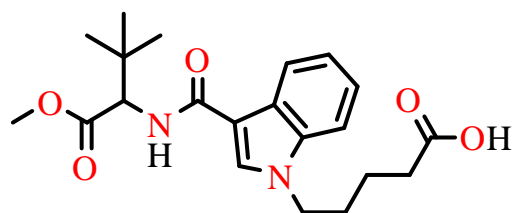
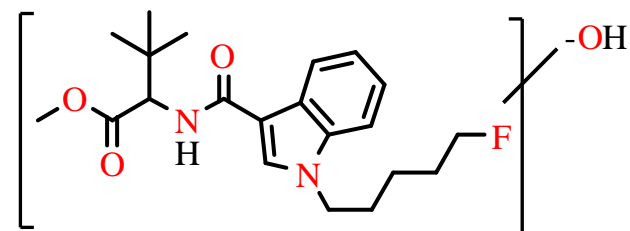
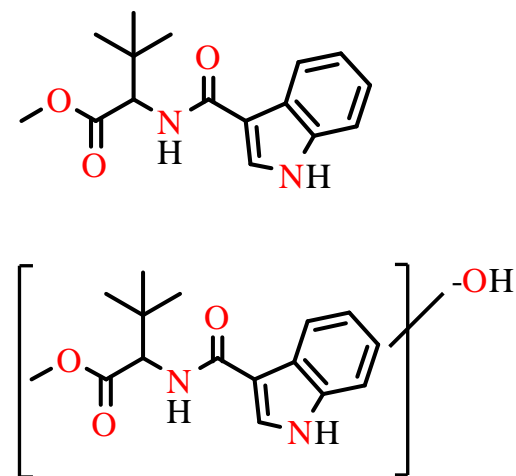
гидроксилирование

дефторирование + гидроксилирование

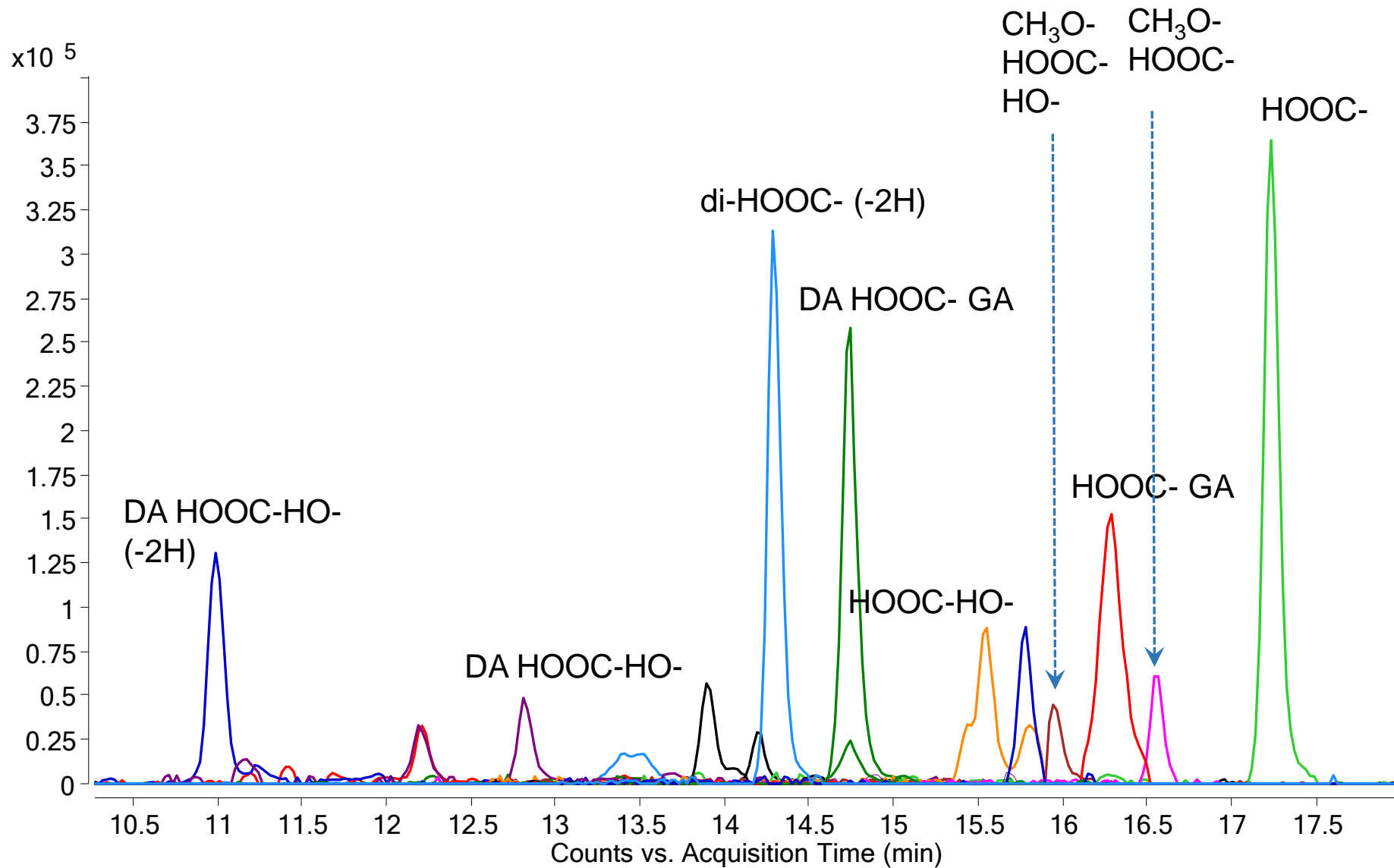
деалкилирование (II) + гидроксилирование

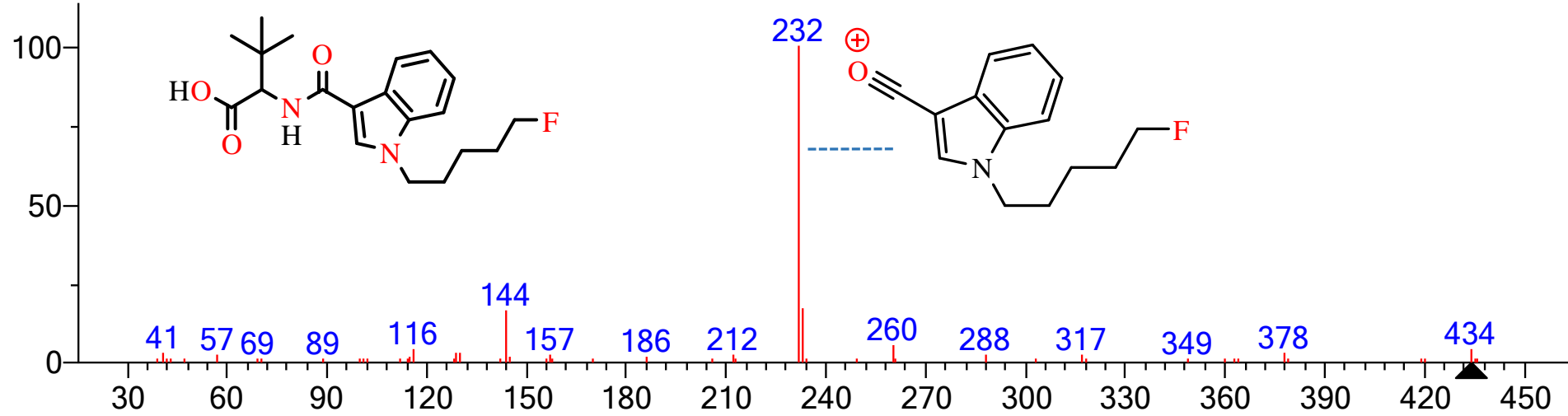
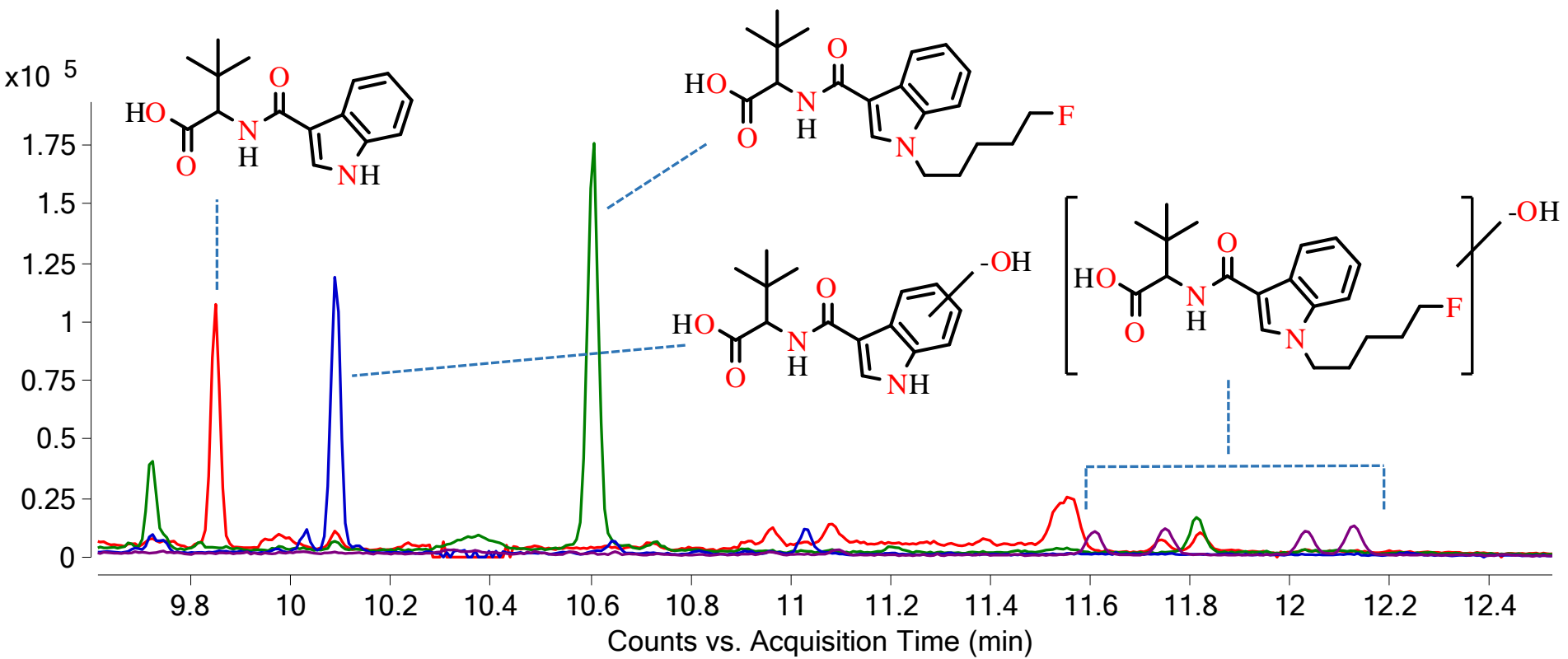


деалкилирование (I) + гидроксилирование



DA = дезалкил (I)





TMSP-CHMINACA, моногидроксилированные метаболиты и артефакты в моче (LC-QTOF, ± 5 мДа)

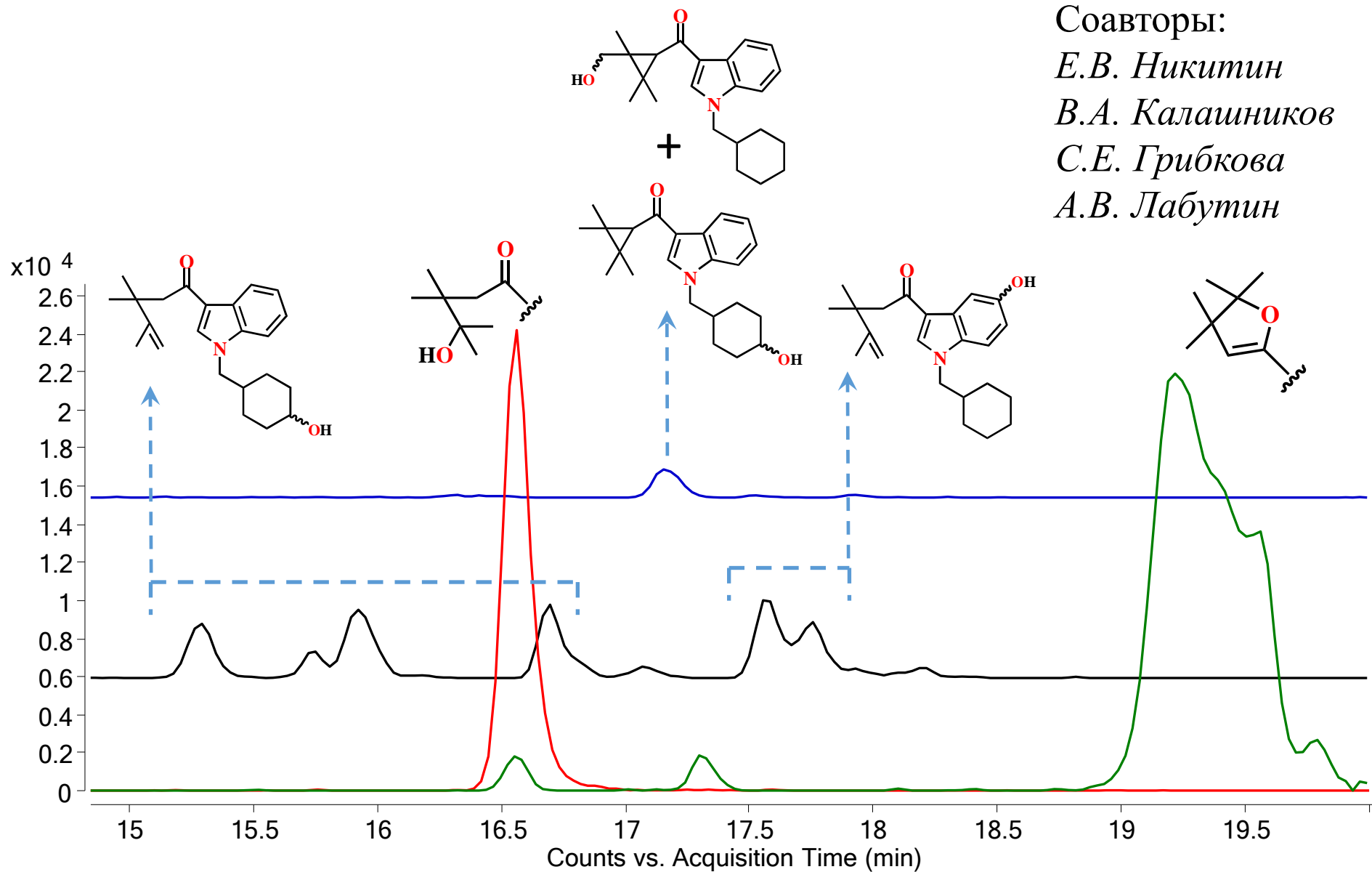
Соавторы:

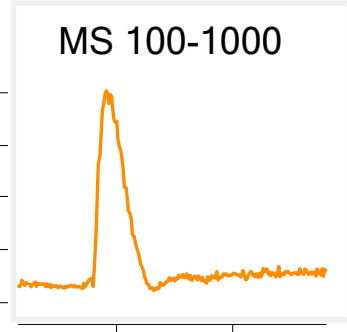
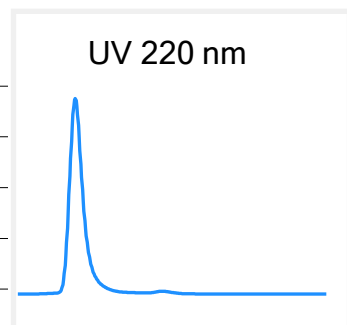
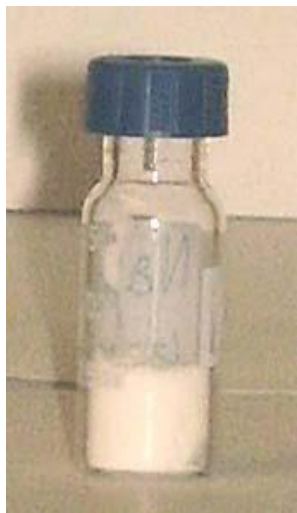
Е.В. Никитин

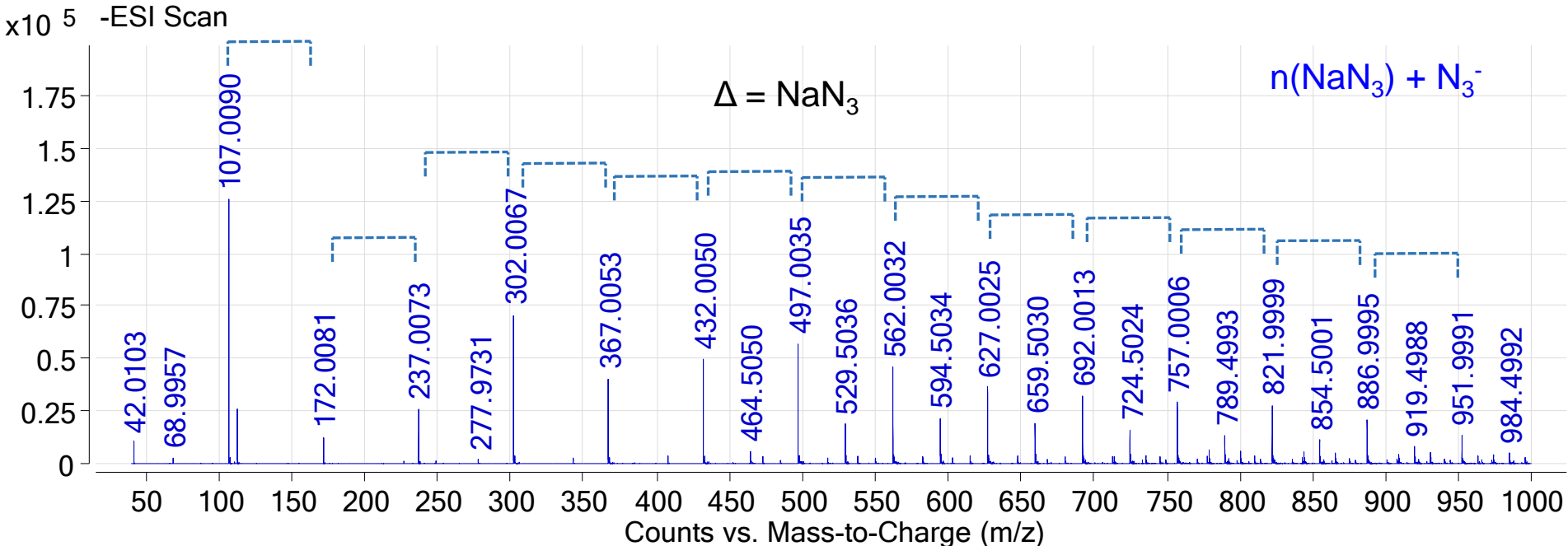
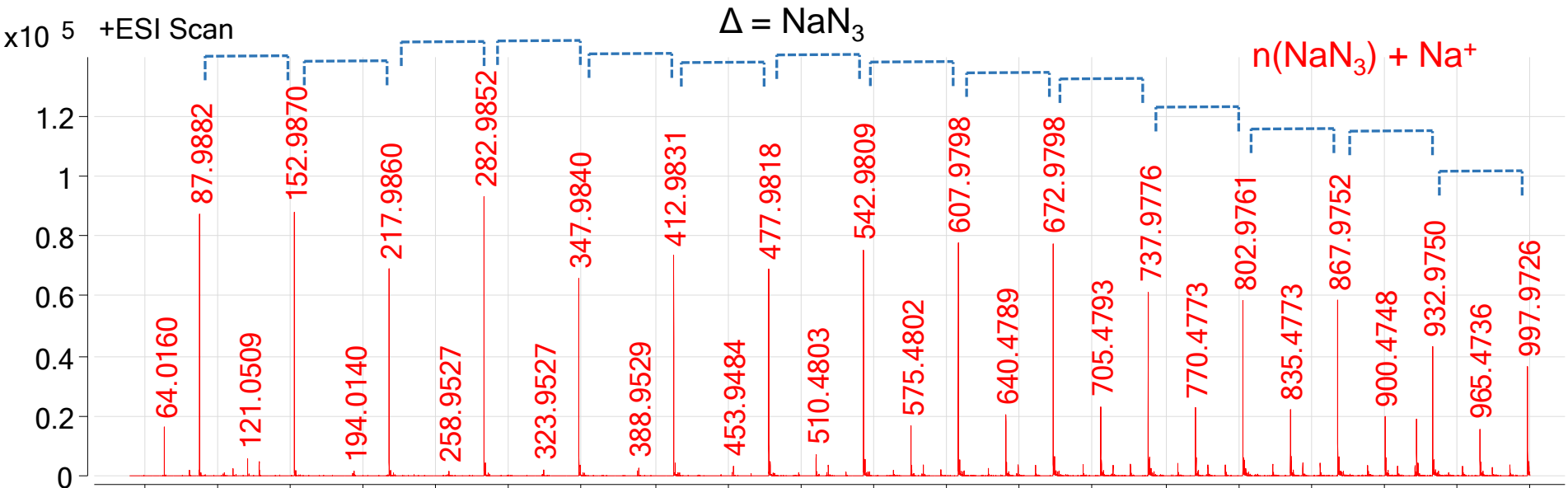
В.А. Калашников

С.Е. Грибкова

А.В. Лабутин







Counts vs. Mass-to-Charge (m/z)