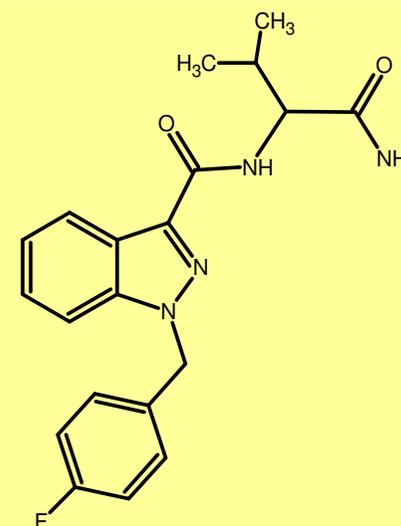
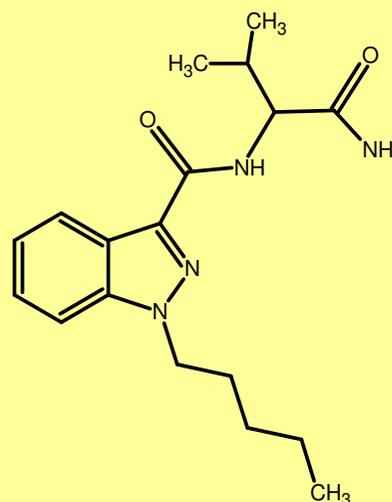
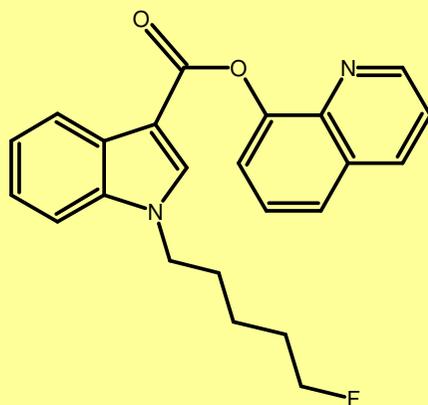
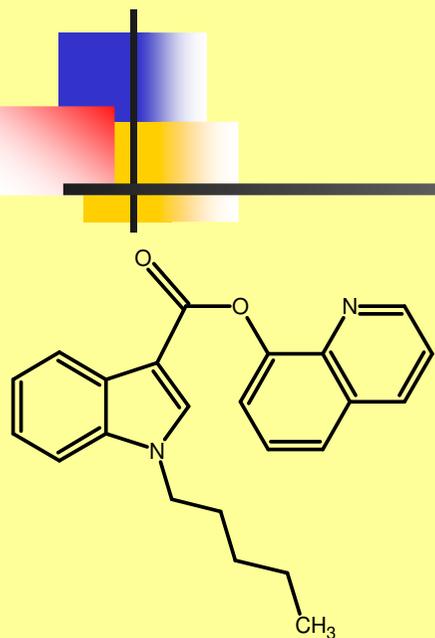


Идентификация и применение маркеров новых каннабимиметиков в анализе мочи

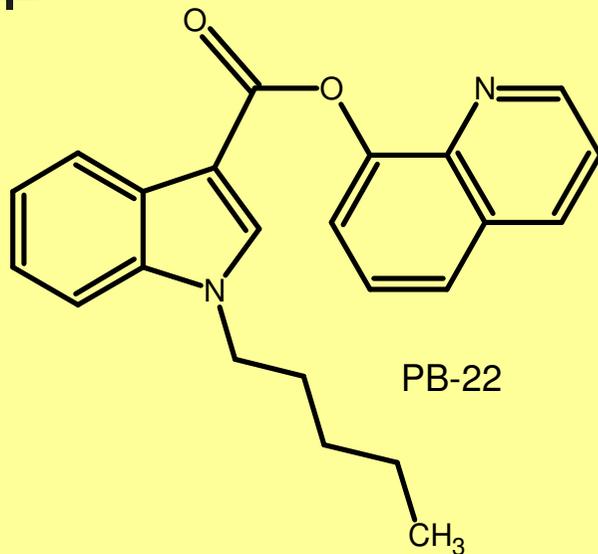


Катаев С.С., Мелентьев А.Б., Дворская О.Н.

Москва, 2013

Синтетические каннабимиметики

Алкилиндолы, группа эфиров 8-оксихинолина



Хинолин-8-ил-1-пентил-1*H*-индол-3-карбоксилат

Синонимы: PB-22, QCBL-018, QUPIC

CAS № 1400742-17-7

Брутто формула: C₂₃H₂₂N₂O₂

Молекулярная масса = 358.4 г/моль

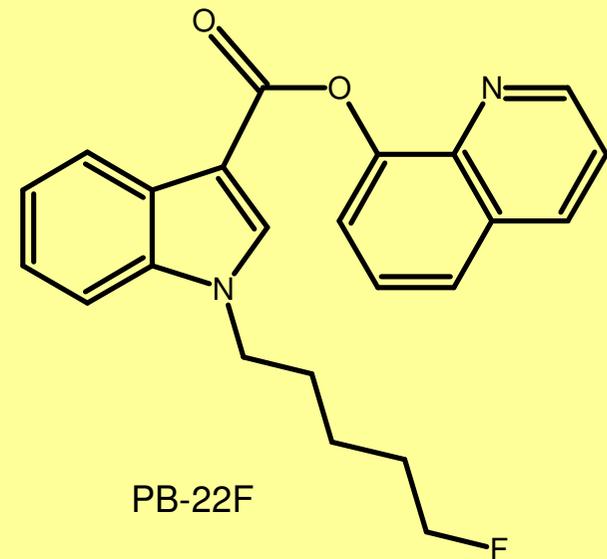
Хинолин-8-ил-1-(5-фторпентил)-1*H*-индол-3-карбоксилат

Синонимы: PB-22F, 5F-PB22, QCBL-2201

CAS № 1400742-41-7

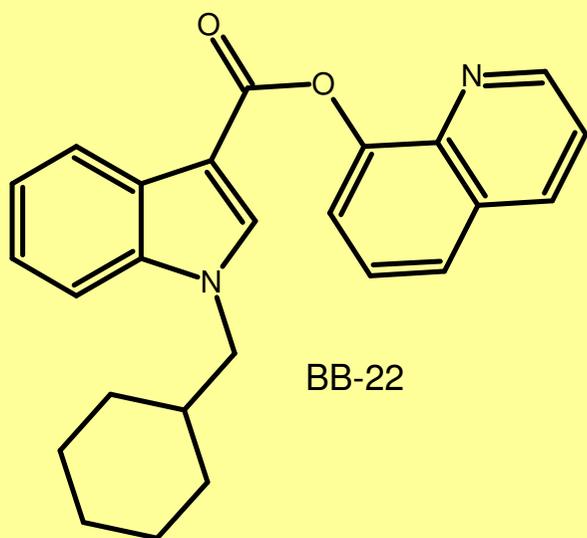
Брутто формула: C₂₃H₂₁FN₂O₂

Молекулярная масса = 376.4 г/моль



Синтетические каннабимиметики

Алкилиндолы, группа эфиров 8-оксихинолина



Хинолин-8-ил-1-(циклогексилметил)-
1*H*-индол-3-карбоксилат

Синонимы: BB-22, QUCNIC

CAS № 1400742-42-8

Брутто формула: C₂₅H₂₄N₂O₂

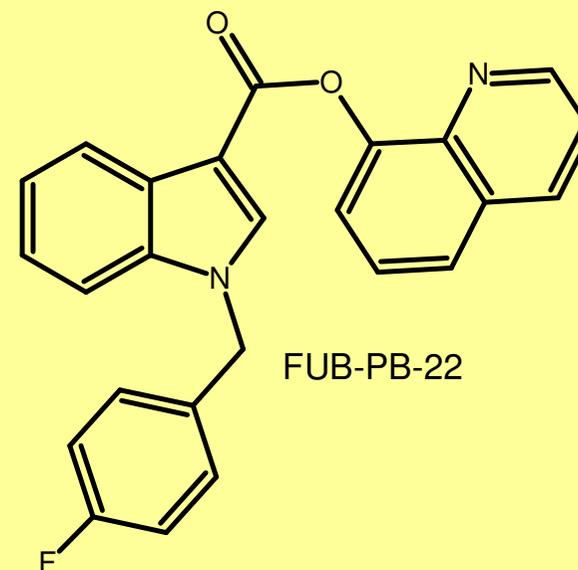
Молекулярная масса = 384.5 г/моль

Хинолин-8-ил-1-[(4-фторфенил)метил]-
1*H*-индол-3-карбоксилат

Синонимы: FUB-PB-22

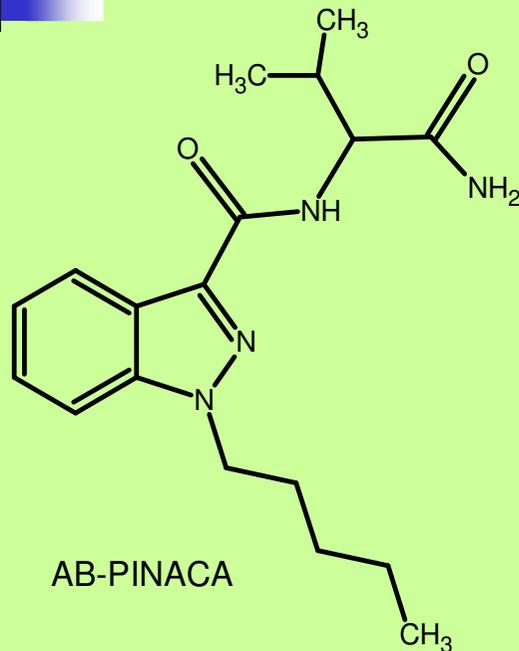
Брутто формула: C₂₅H₁₇FN₂O₂

Молекулярная масса = 396.4 г/моль



Синтетические каннабимиметики

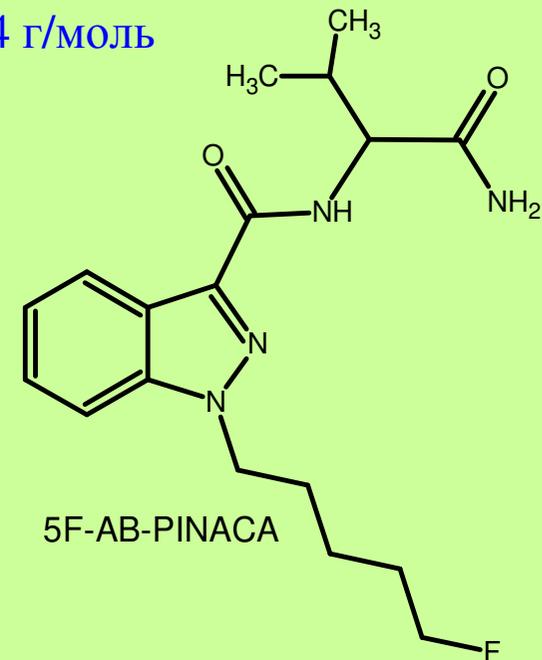
Алкилиндазолы, группа амидов валина (АВ)



AB-PINACA

N-[1-(Карбамоил)-2-метилпропил]-1-(5-фторпентил)-1H-индазол-3-карбоксамид
Синонимы: 5F-AB-PINACA
Брутто формула: C₁₈H₂₅FN₄O₂
Молекулярная масса = 348.4 г/моль

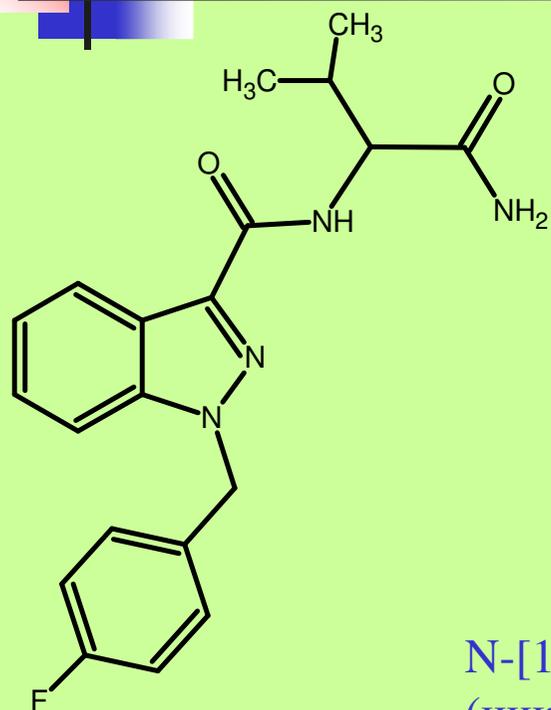
N-[1-(Карбамоил)-2-метилпропил]-1-пентил-1H-индазол-3-карбоксамид
Синонимы: AB-PINACA
CAS № 1445752-09-9
Брутто формула: C₁₈H₂₆N₄O₂
Молекулярная масса = 330.4 г/моль



5F-AB-PINACA

Синтетические каннабимиметики

Алкилиндазолы, группа амидов валина (АВ)



AB-FUBINACA

N-[1-(Карбамоил)-2-метилпропил]-1-[(4-фторфенил)метил]-1*H*-индазол-3-карбоксамид

Синонимы: АВ-FUBINACA

CAS № 1185282-01-2

Брутто формула: C₂₀H₂₁FN₄O₂

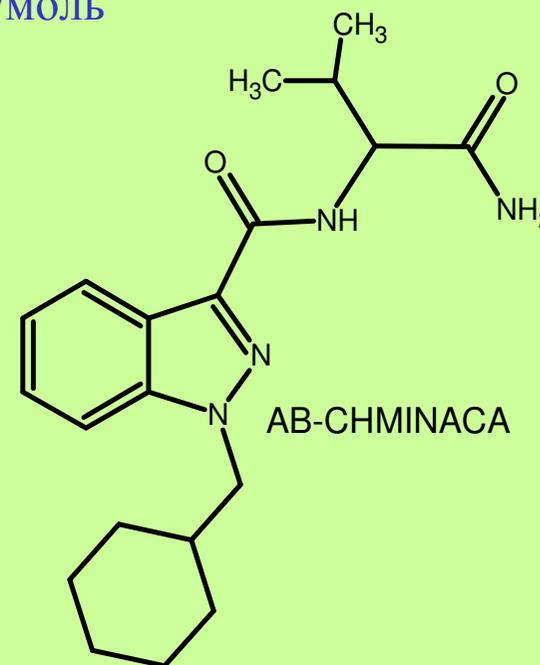
Молекулярная масса = 368.4 г/моль

N-[1-(Карбамоил)-2-метилпропил]-1-(циклогексилметил)-1*H*-индазол-3-карбоксамид

Синонимы: АВ-CHMINACA

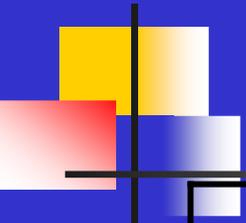
Брутто формула: C₂₀H₂₈N₄O₂

Молекулярная масса = 356.4 г/моль



AB-CHMINACA

Динамика выявления каннабимиметиков в Пермском крае

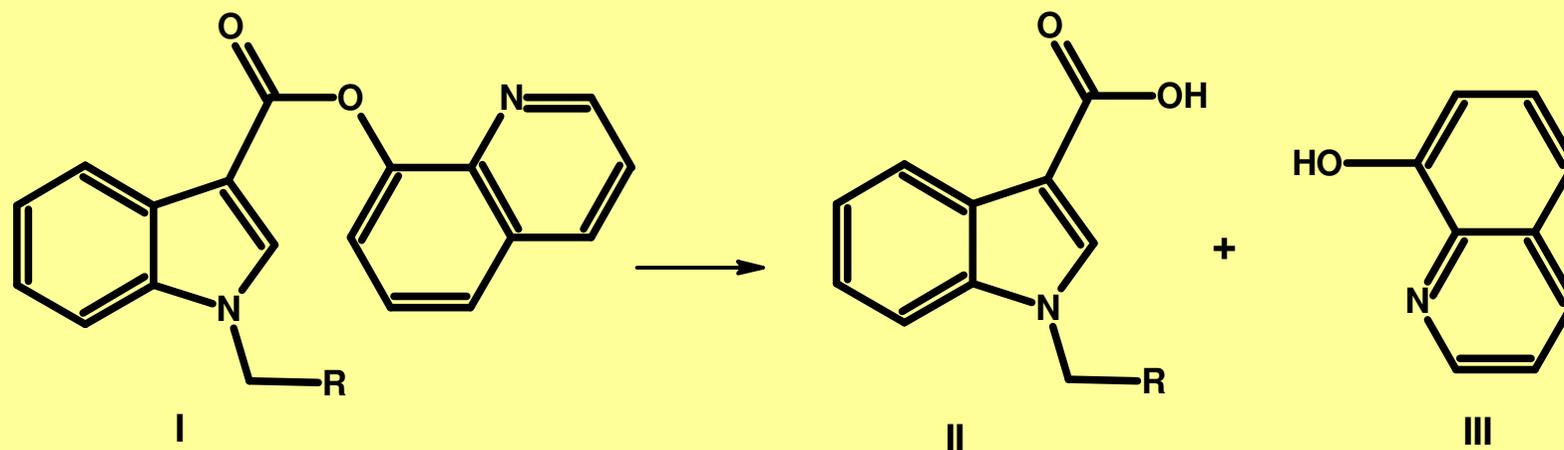


Наименование	Выявлено в Пермском крае	Определены маркеры	Запрещены
PB-22	декабрь 2012	февраль 2013	ПП580
PB-22F	февраль 2013	февраль 2013	ПП580
AB-PINACA	июнь 2013	июнь 2013	ПП788
BB-22	июль 2013	Н.о.	ПП580
AB-CHMINACA	август 2013	сентябрь 2013	ПП788
AB-FUBINACA	Нет информации	сентябрь 2013	ПП788
5F-AB-PINACA	сентябрь 2013	Н.о.	ПП788
FUB-PB-22	сентябрь 2013	Н.о.	?

ПП580 - Постановление Правительства РФ от 10.07.2013 N 580

ПП788 - Постановление Правительства РФ от 09.09.2013 N 788

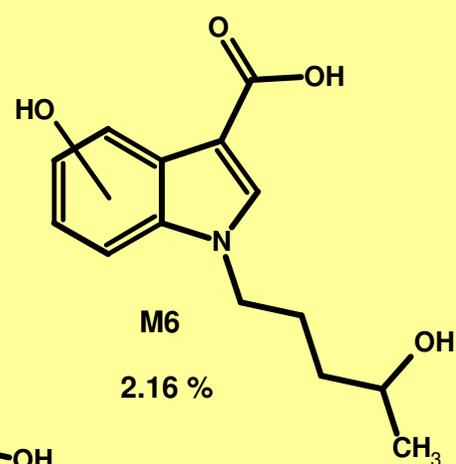
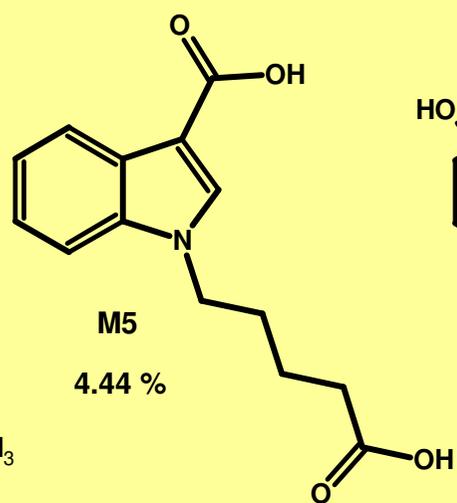
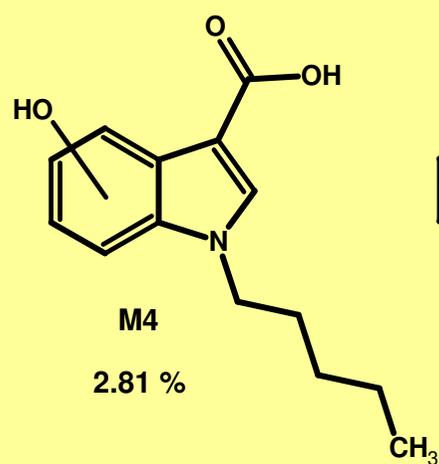
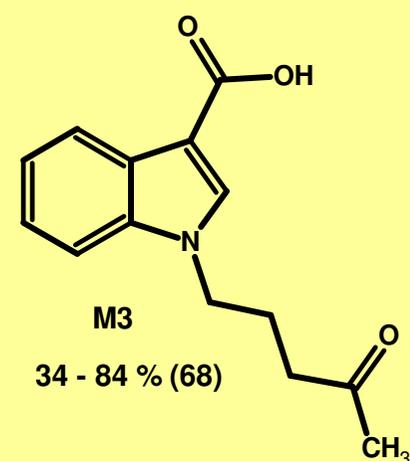
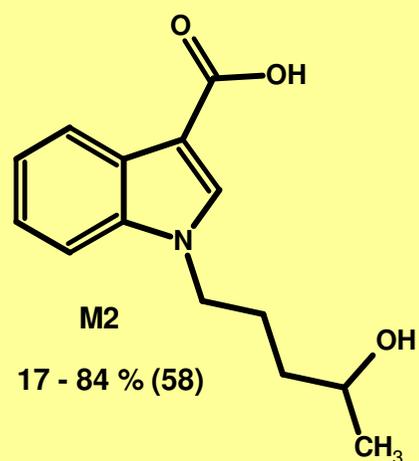
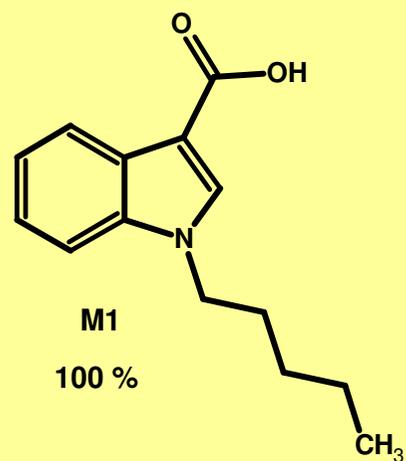
Маркеры каннабимиметиков группы эфиров 8-оксихинолина



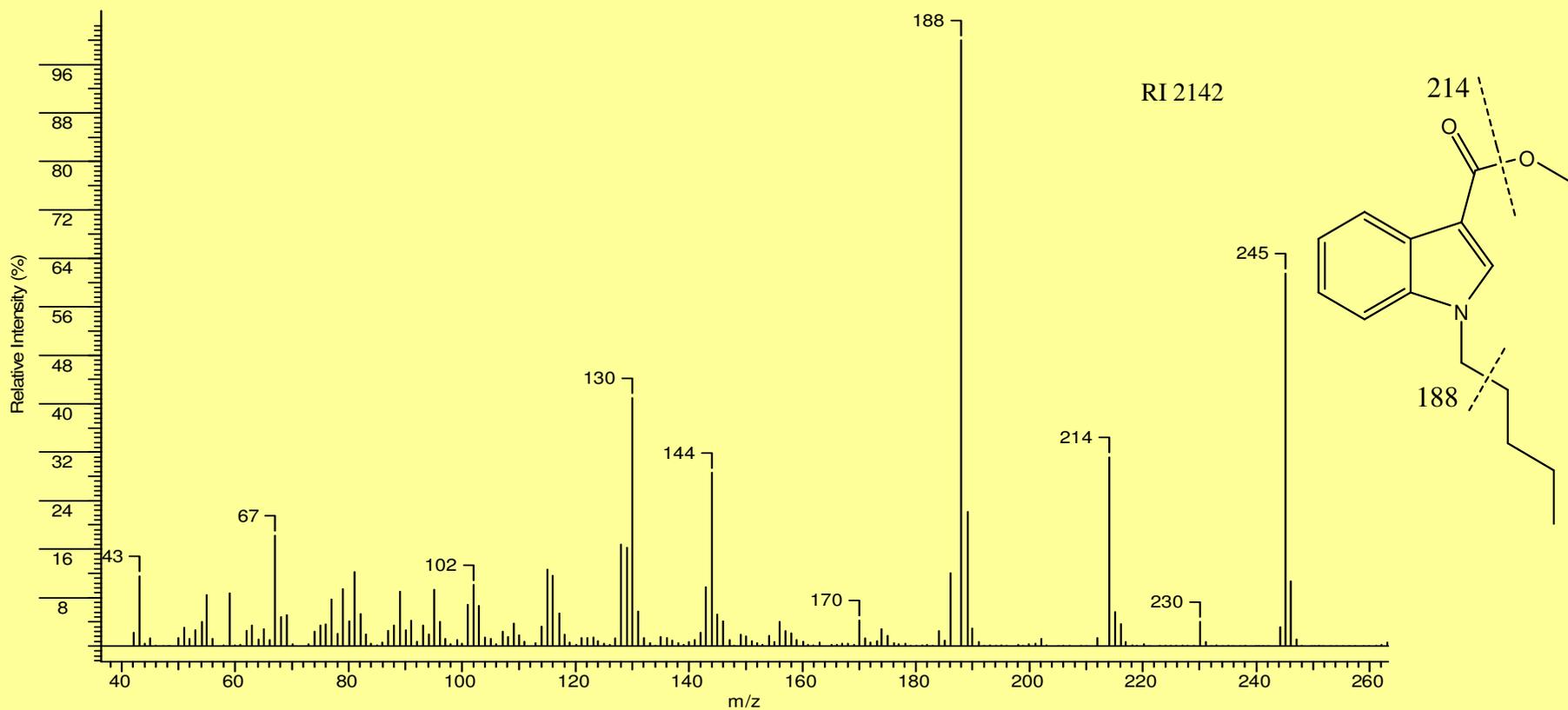
Химическая структура каннабимиметиков РВ-22, РВ-22F, ВВ-22, FUB-РВ-22 (соединение I), их маркеров (соединение II) и 8-оксихинолина (соединение III).

РВ-22, R = C₄H₉; РВ-22F, R = C₄H₉F; FUB-РВ-22, R = п-FC₆H₄;
ВВ-22, R = циклогексил-

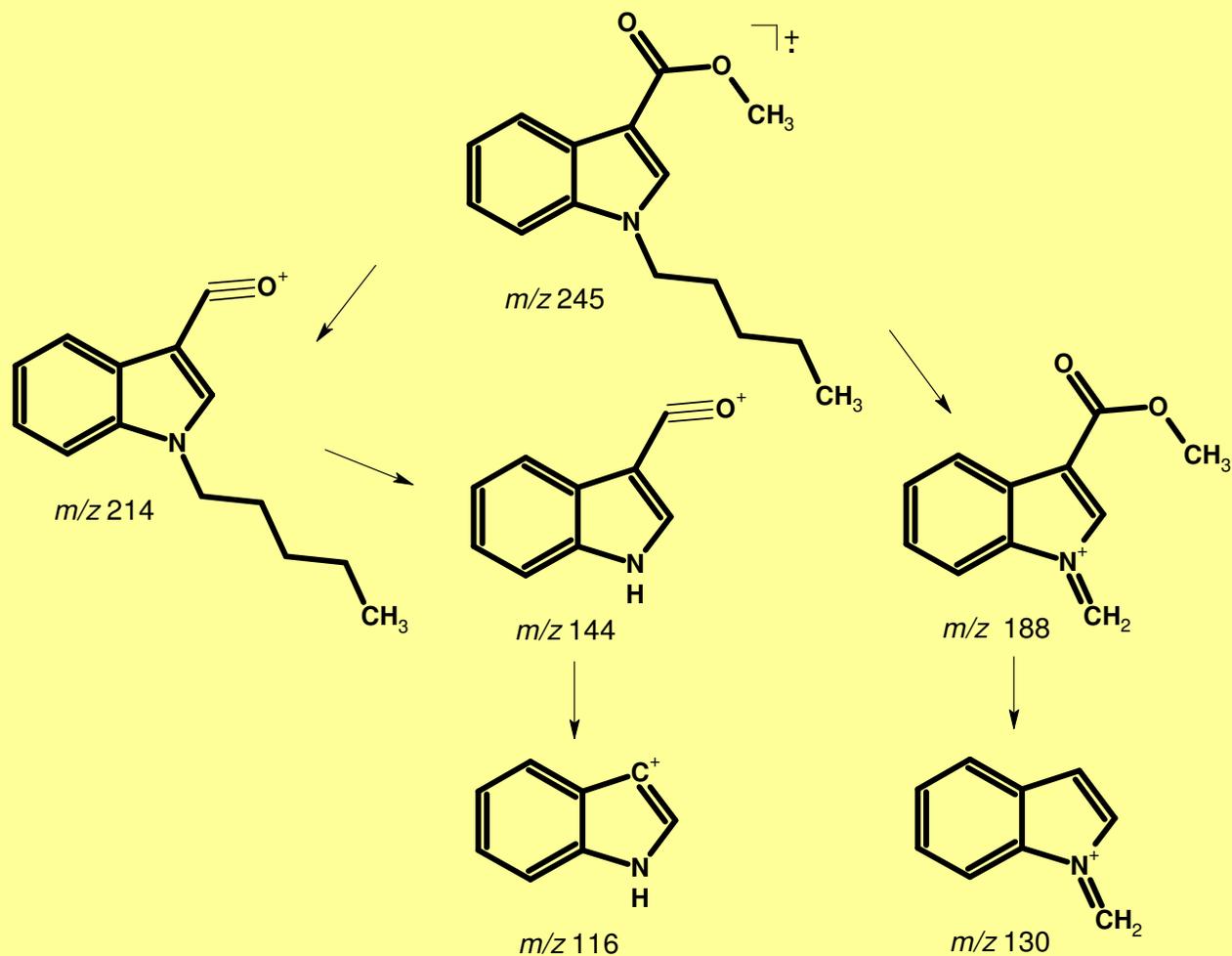
Метаболиты РВ-22 и их относительное содержание



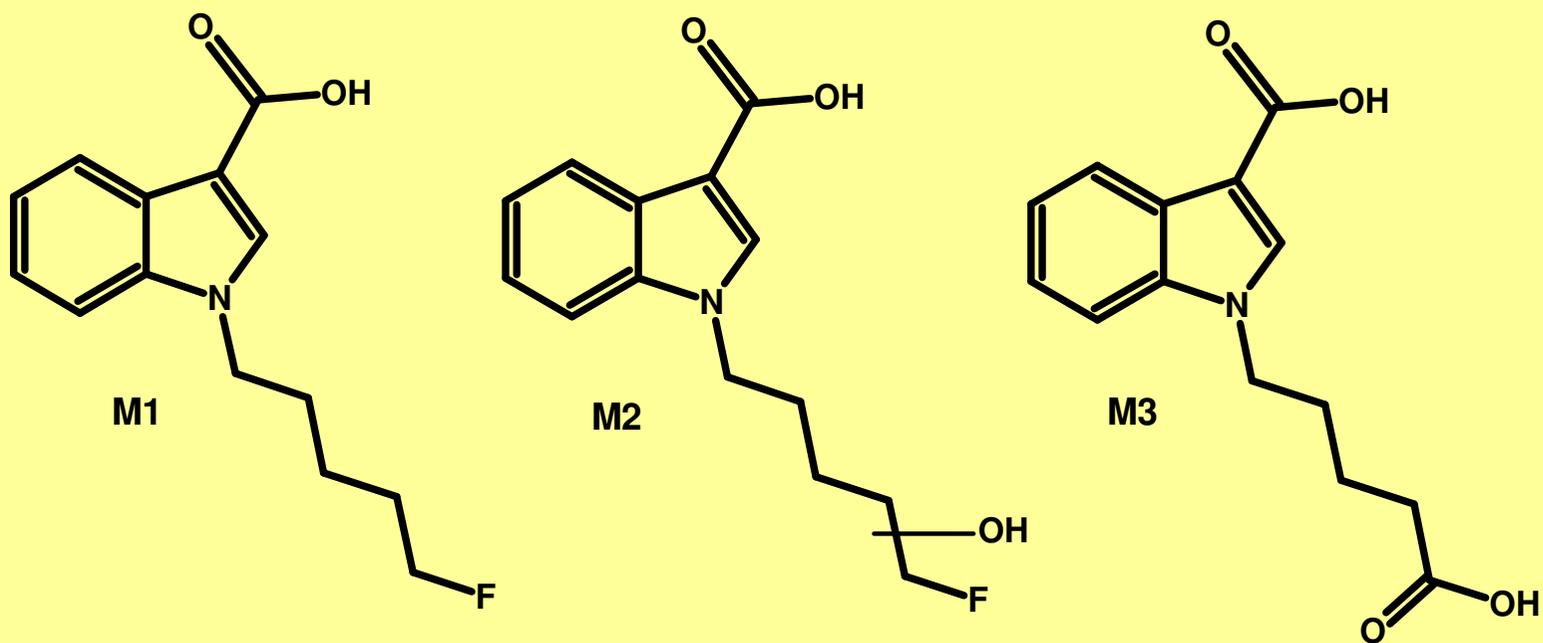
Масс-спектр метилового эфира маркера РВ-22



Масс-фрагментация метилового эфира 1-пентил-1*H*-индол-3-карбоновой КИСЛОТЫ



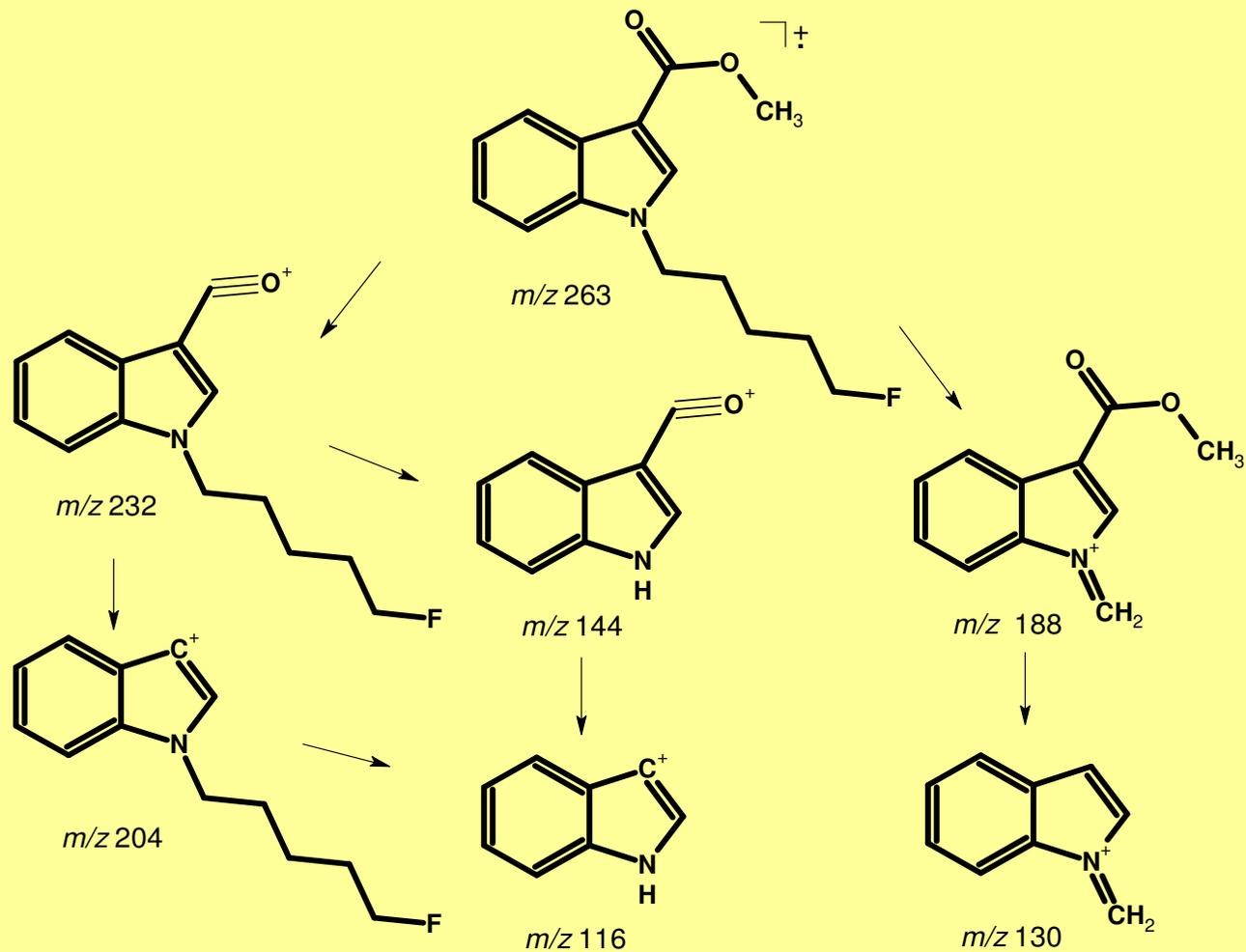
Основные метаболиты РВ-22F



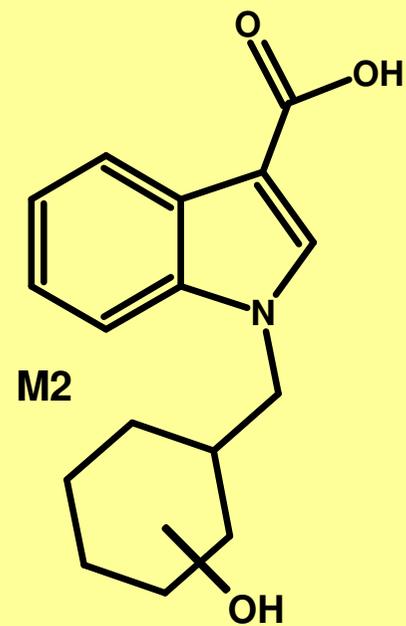
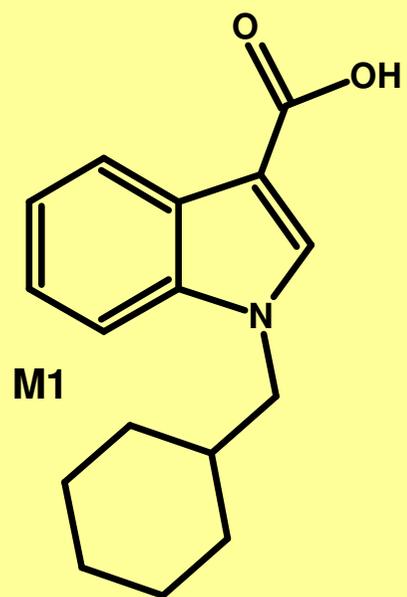
Масс-спектр метилового эфира маркера РВ-22F



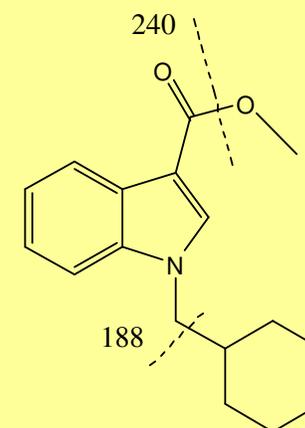
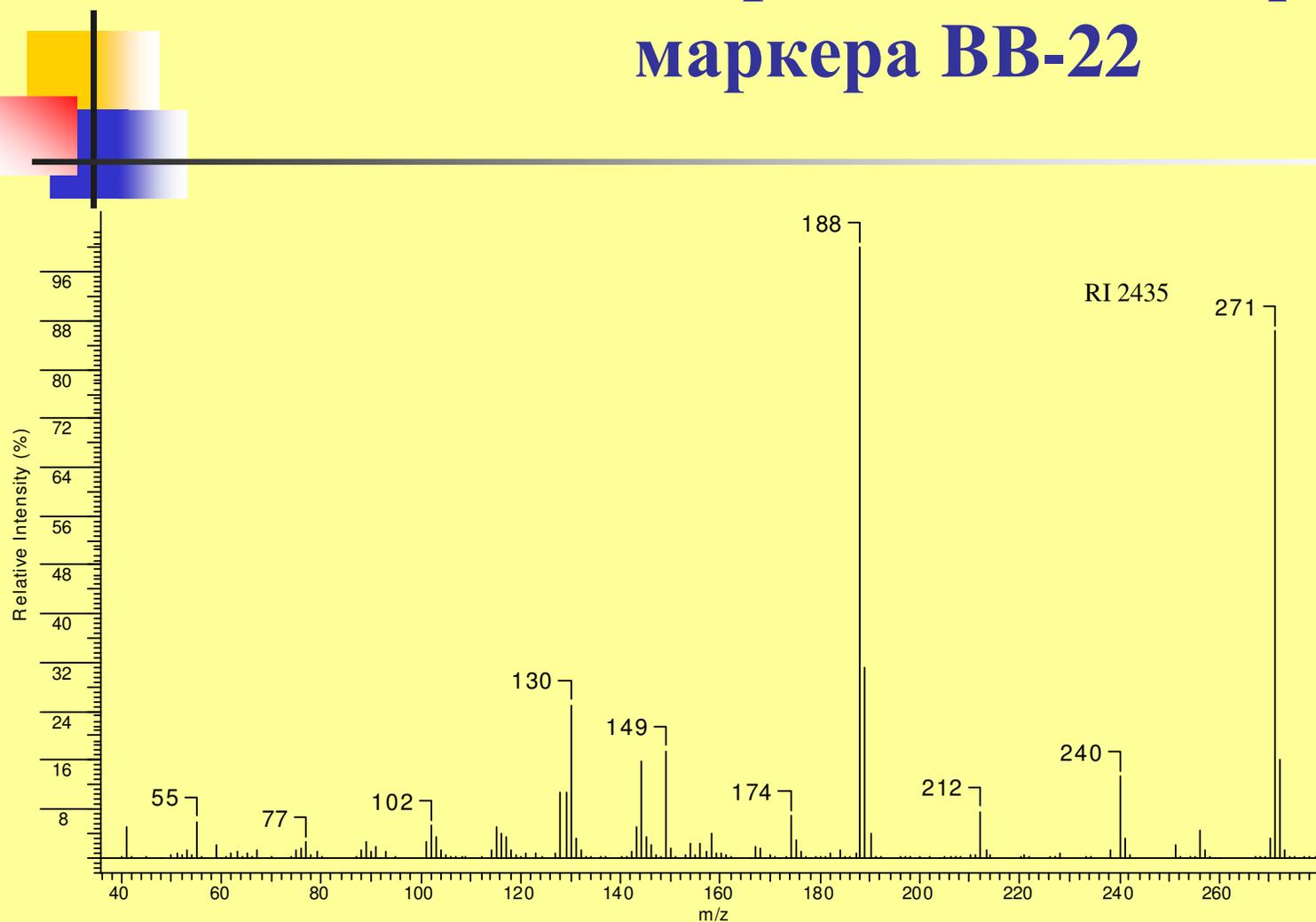
Масс-фрагментация метилового эфира 1-(5-фторпентил)-1H-индол-3- карбоновой кислоты

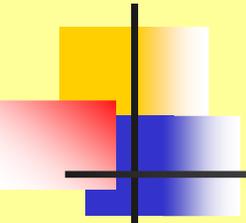


Основные метаболиты ВВ-22

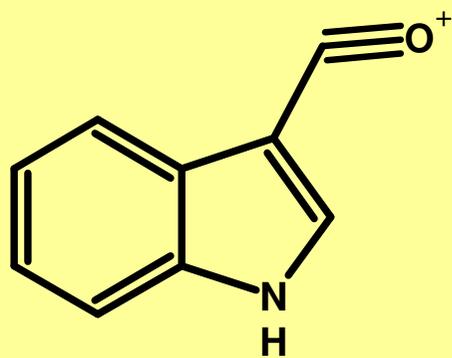


Масс-спектр метилового эфира маркера ВВ-22

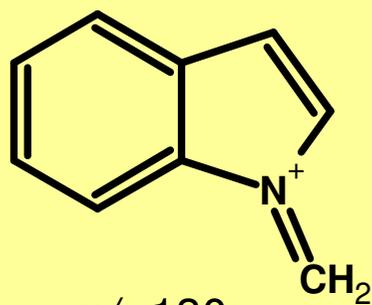




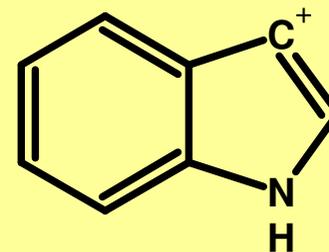
Общие фрагментарные ионы для маркеров PB-22, PB-22F, BB-22



m/z 144

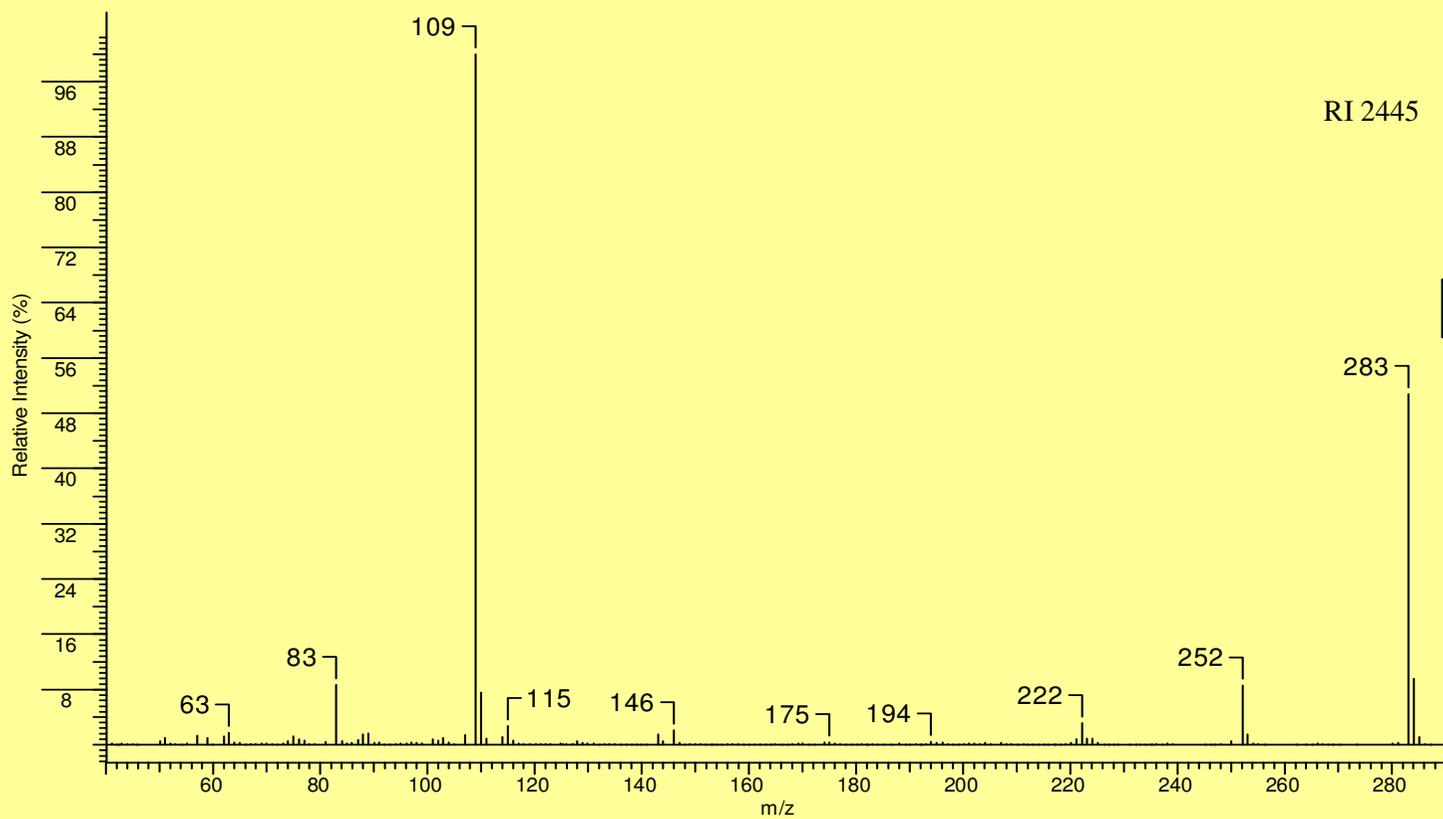


m/z 130

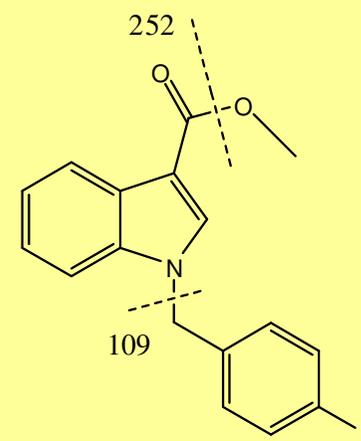


m/z 116

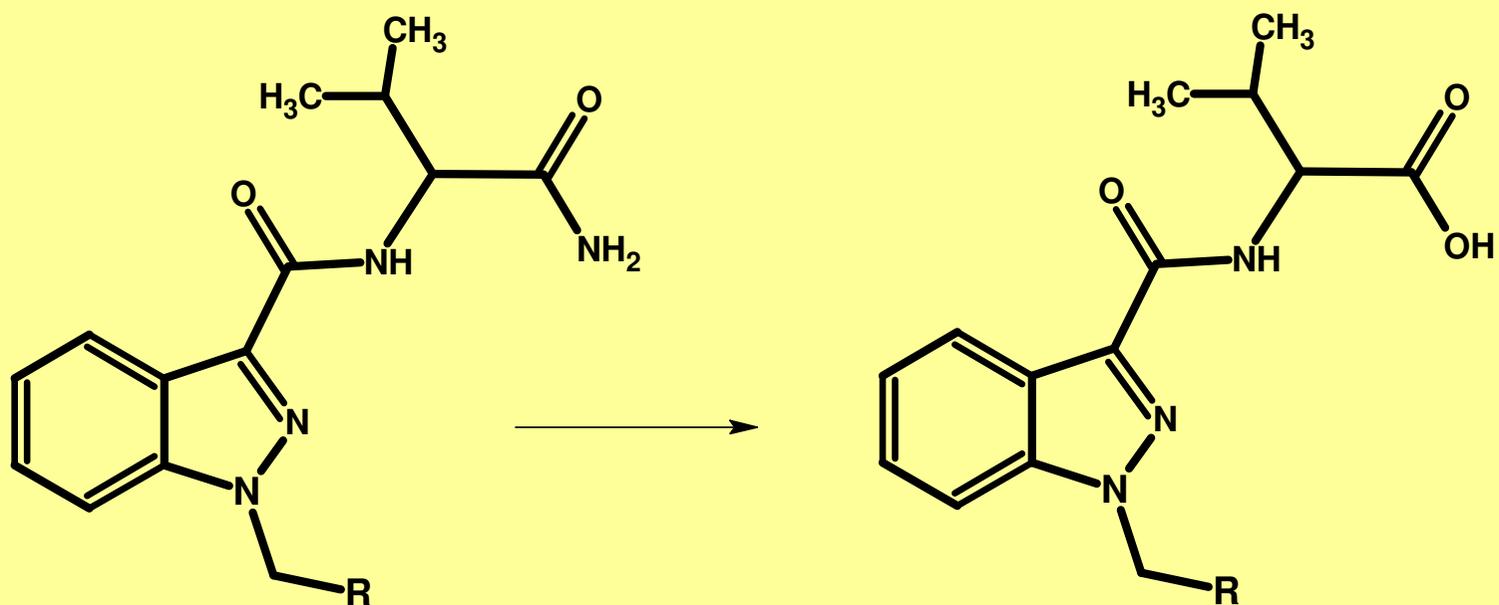
Масс-спектр метилового эфира маркера FUB-PB-22



RI 2445



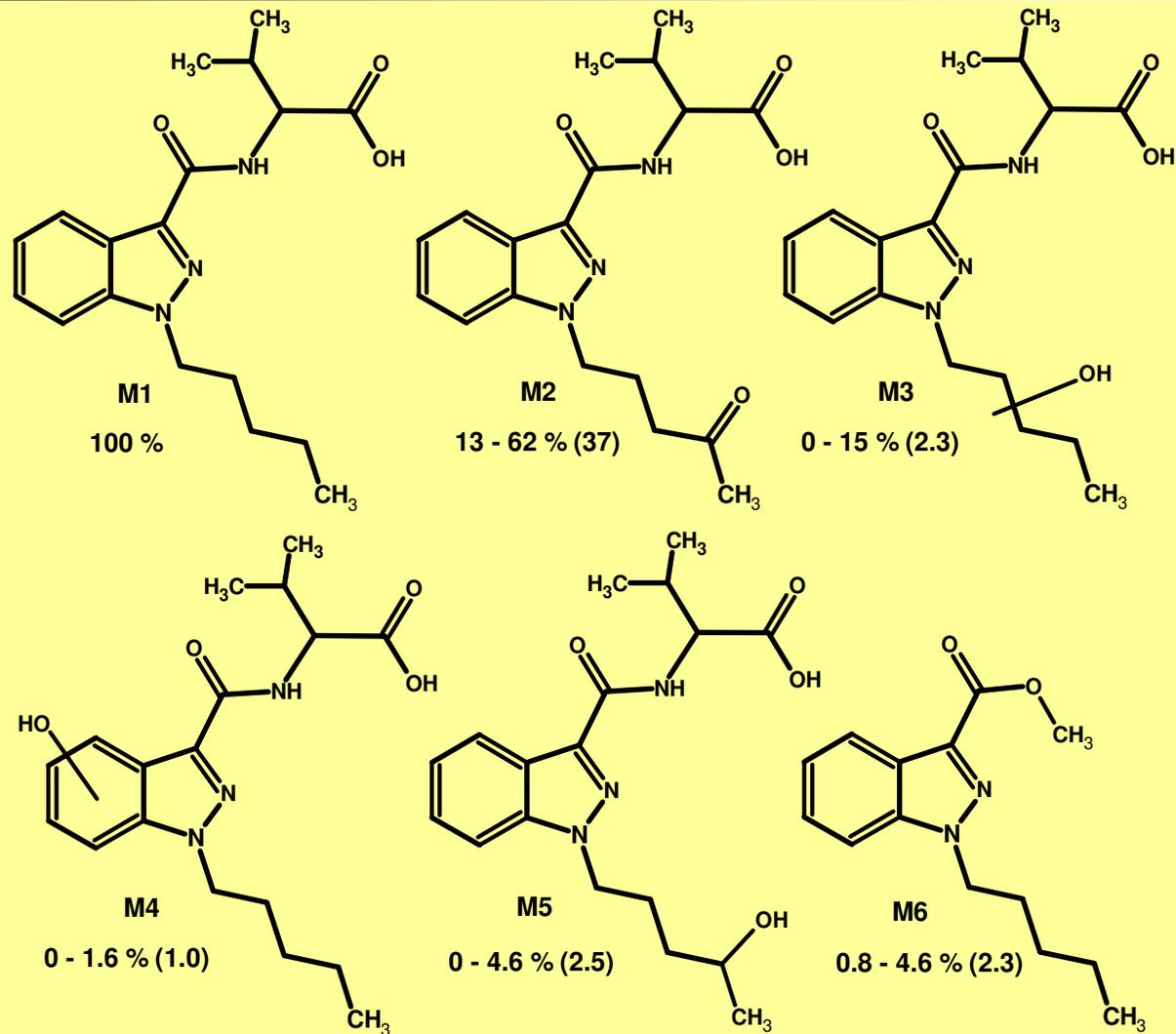
Маркеры каннабимиметиков группы АВ



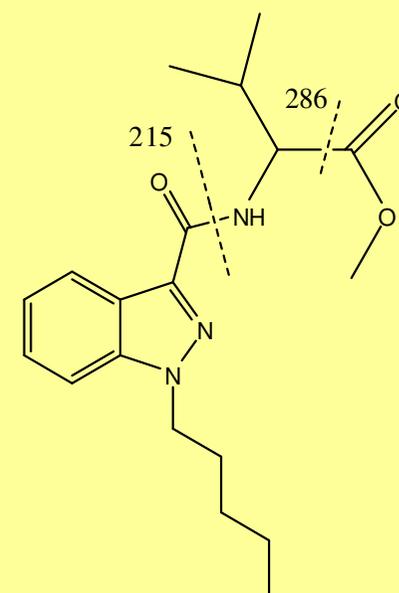
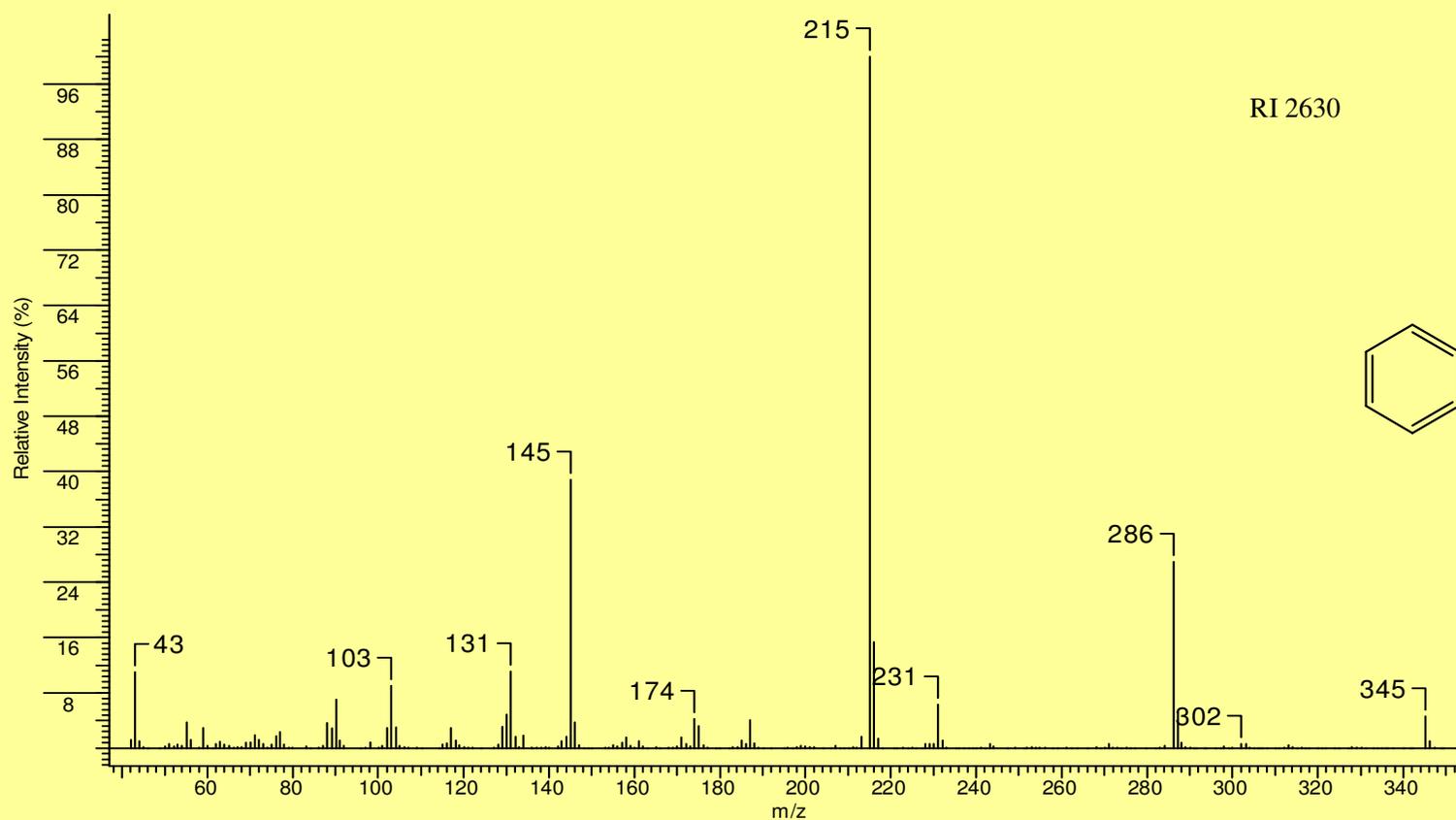
Химическая структура каннабимиметиков АВ-PINACA, 5F-AB-PINACA, АВ-FUBINACA, АВ-CHMINACA и их маркеров

AB-PINACA, R = C₄H₉; 5F-AB-PINACA, R = C₄H₉F;
AB-FUBINACA, R = п-FC₆H₄; АВ-CHMINACA, R = циклогексил-

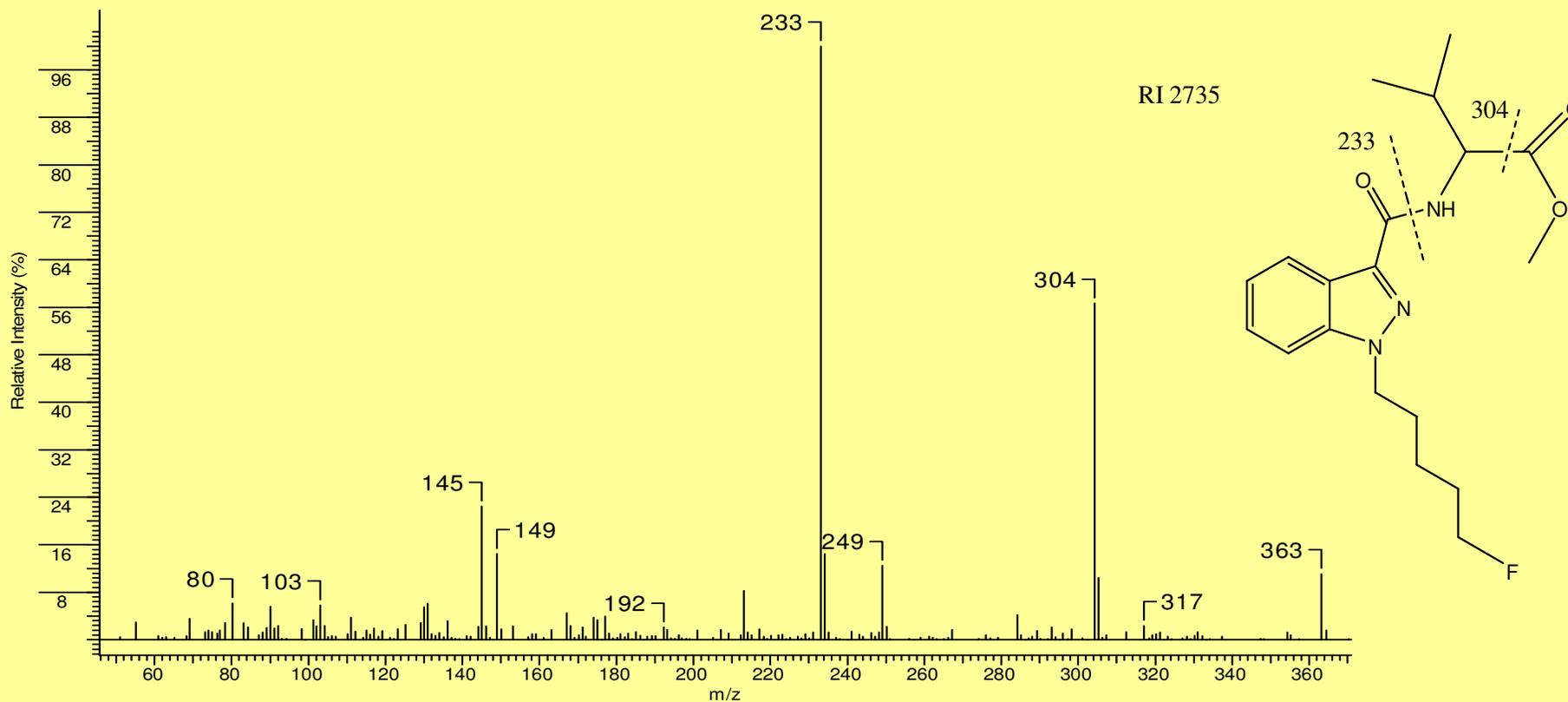
Метаболиты АВ-PINACA и их относительное содержание



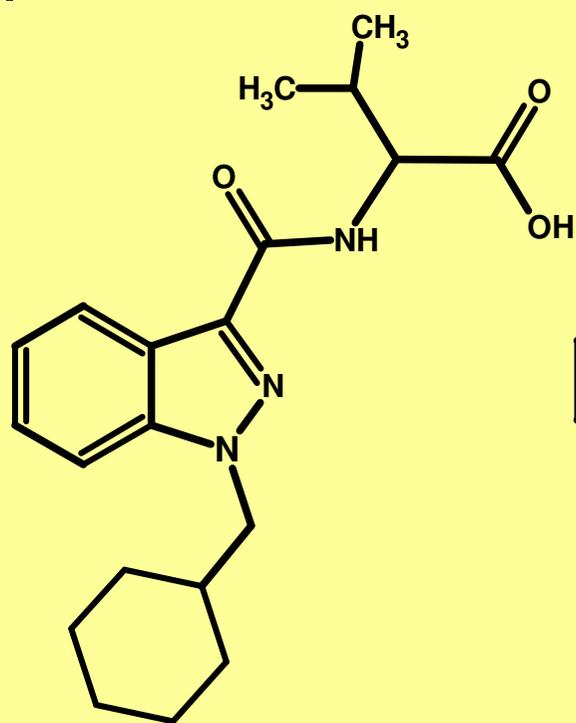
Масс-спектр метилового эфира маркера АВ-PINACA



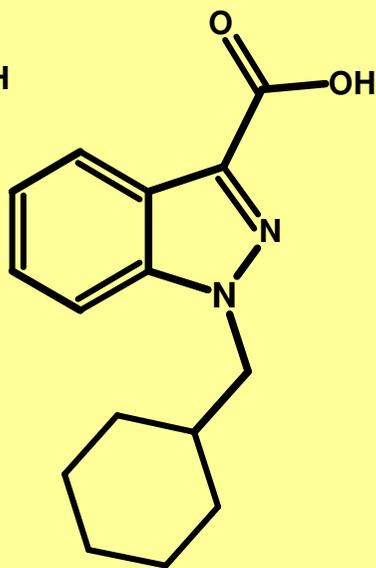
Масс-спектр метилового эфира маркера 5F-AB-PINACA



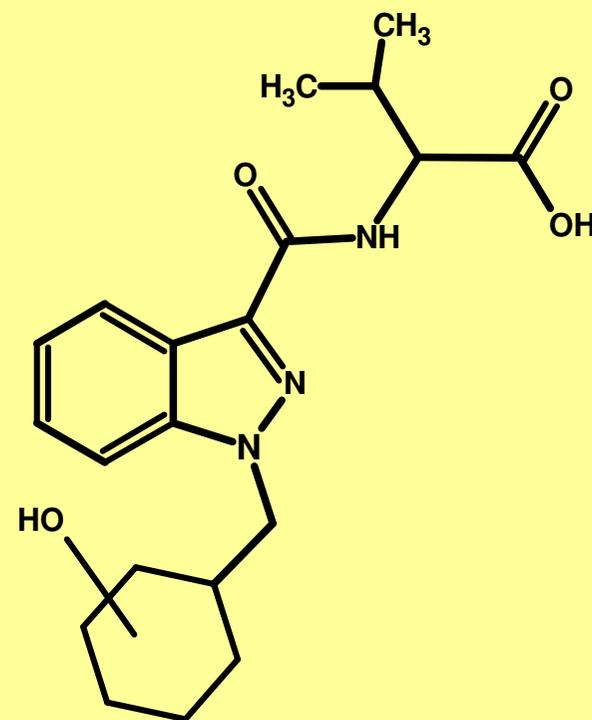
Метаболиты АВ-СНМІНАСА и их относительное содержание



M1
100 %

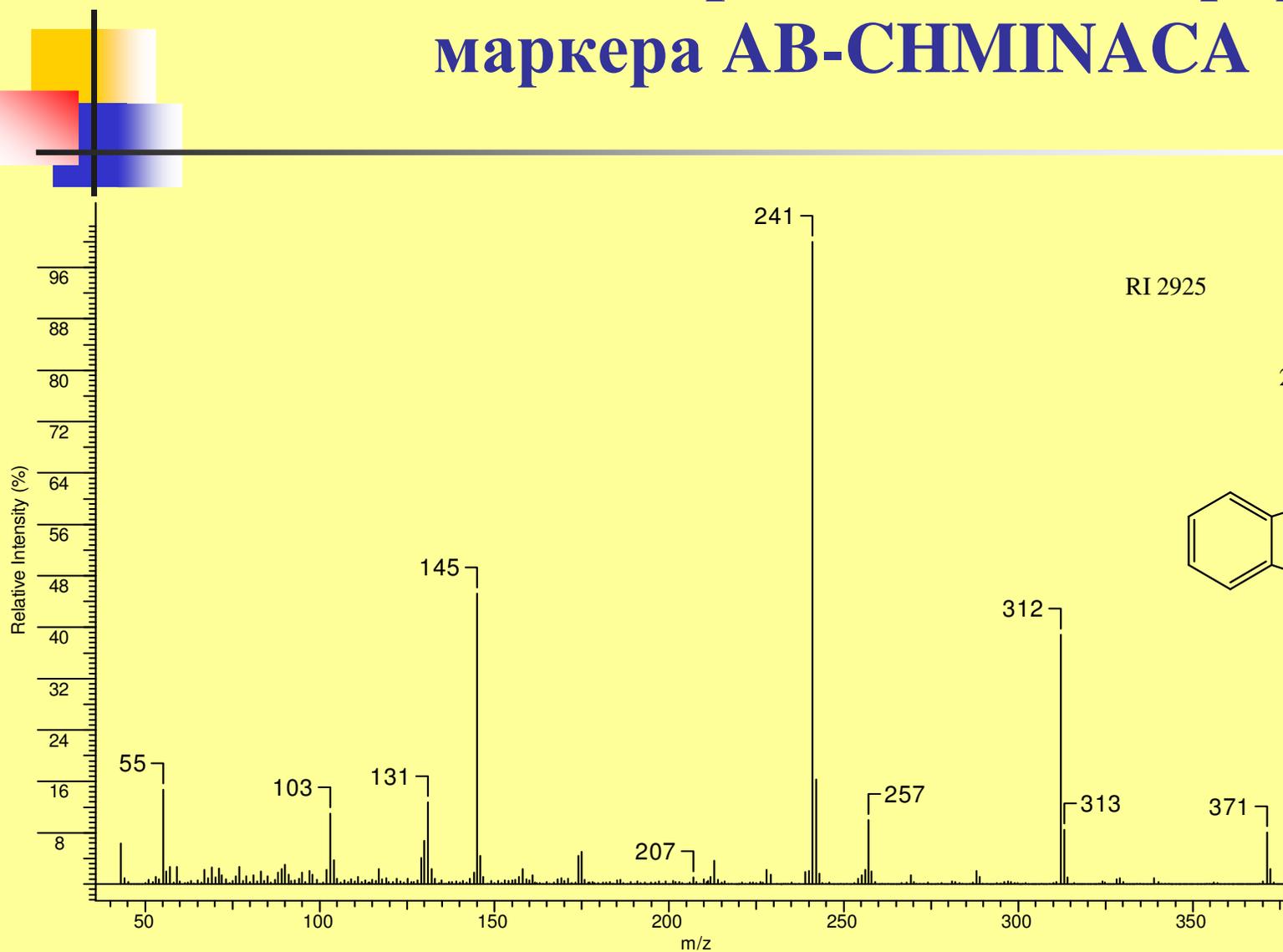


M2
13 - 57 % (30)

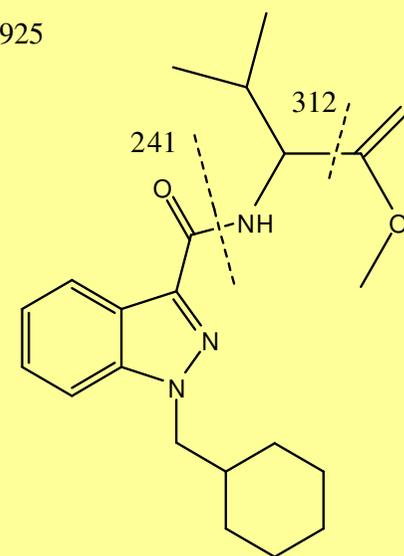


M3
13 - 47 % (39)

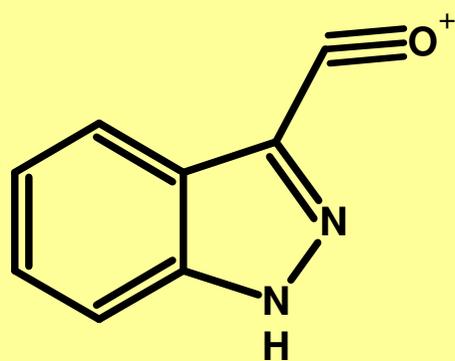
Масс-спектр метилового эфира маркера АВ-СНМІНАСА



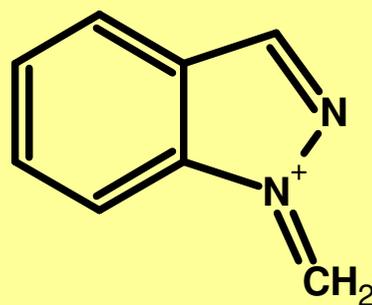
RI 2925



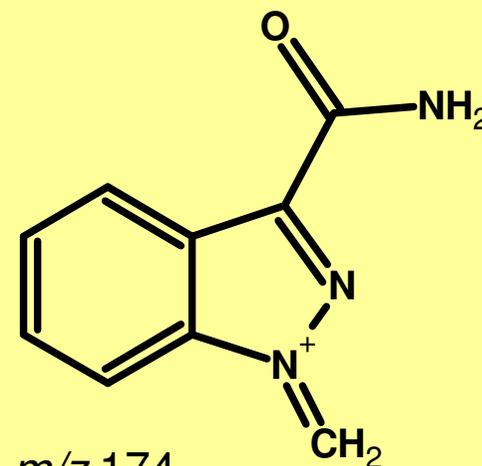
Общие фрагментарные ионы для маркеров АВ-PINACA, 5F-AВ-PINACA, АВ-CHMINACA



m/z 145

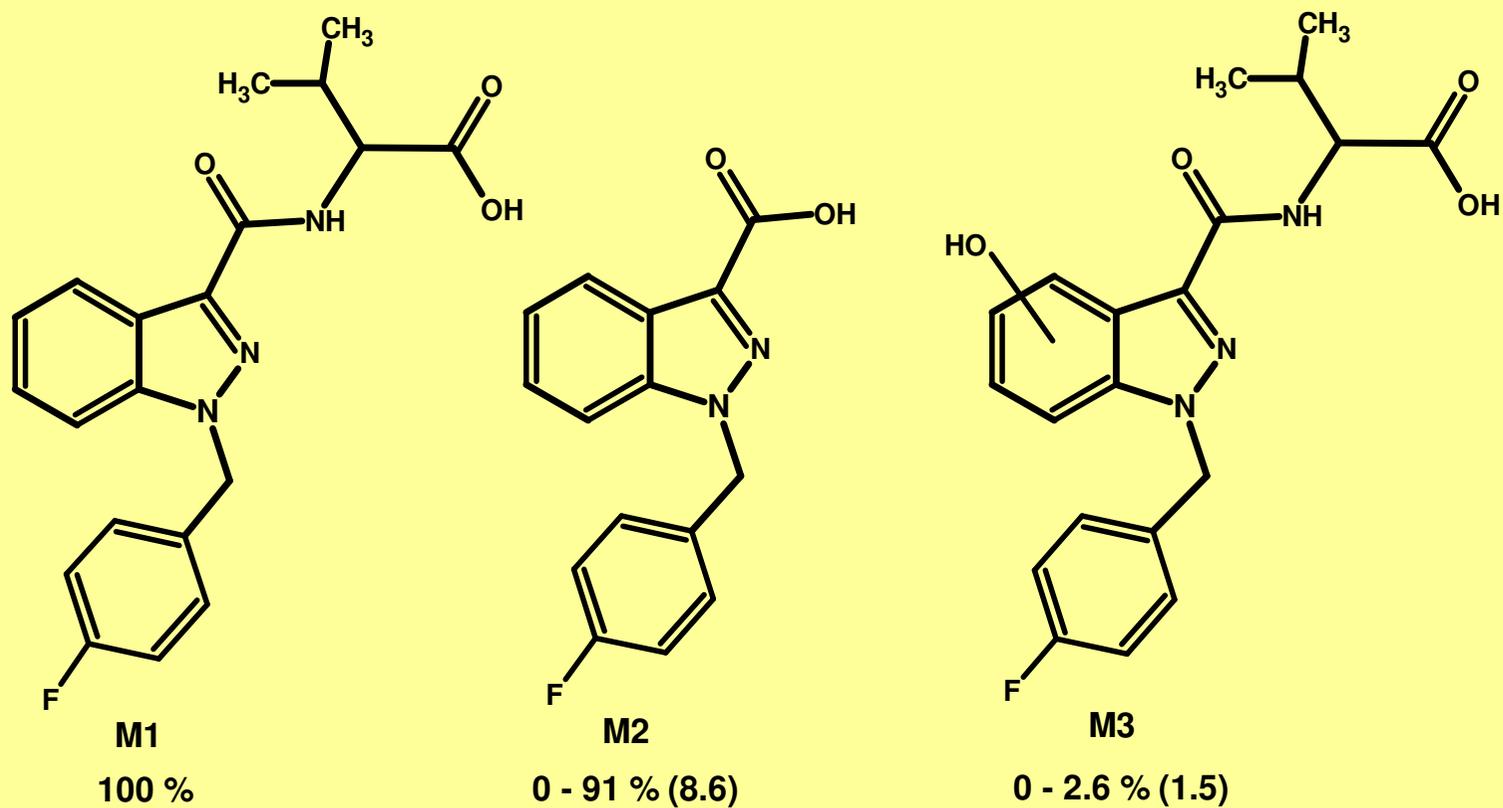


m/z 131

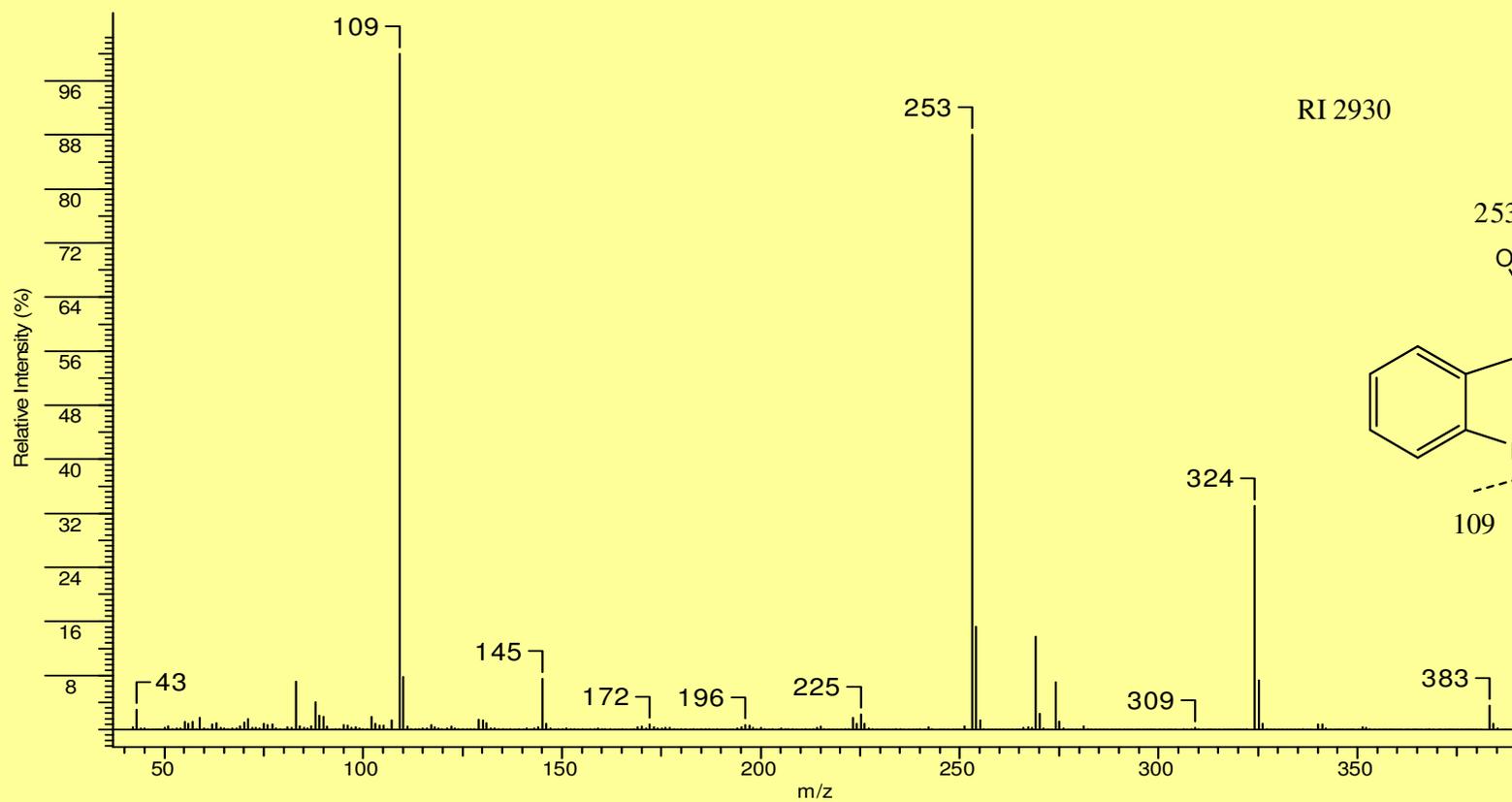


m/z 174

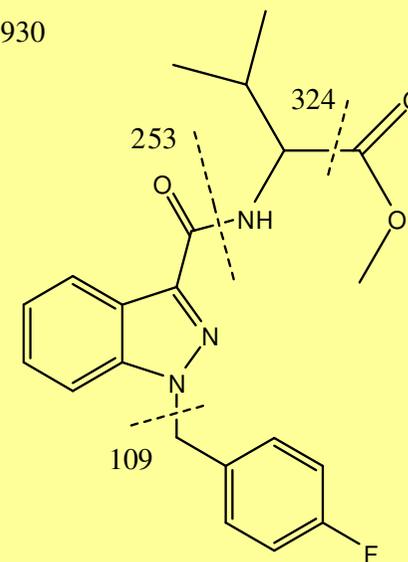
Метаболиты АВ-FUBINACA и их относительное содержание



Масс-спектр метилового эфира маркера АВ-FUBINACA



RI 2930



Твердофазная экстракция маркеров каннабимиметиков

К 0,5 мл мочи прибавляли 250 мкл 1/15M фосфатного буфера pH 6 и 25 мкл β-глюкуронидазы, флакон укупоривали и выдерживали при 45 °С в течение 2 часов

**Патроны для ТФЭ
«SampliQ Evidex»,
3 мл/200 мг**

Кондиционирование
2 мл этанола
2 мл буфера pH 4,8

Загрузка образца
(энзимный гидролиз и
центрифугирование)

Промывка
1 мл буфера pH 4,8
1 мл 10% р-ра этанола
сушка патрона 20 мин

Элюирование 1
2 x 2 мл смеси
гексан-этилацетат (3 : 1)

Вещества кислотного и
нейтрального характера

Элюирование 2
2 x 2 мл смеси
дихлорметан-изопропанол-
25% аммиак (4 : 1 : 0,1)

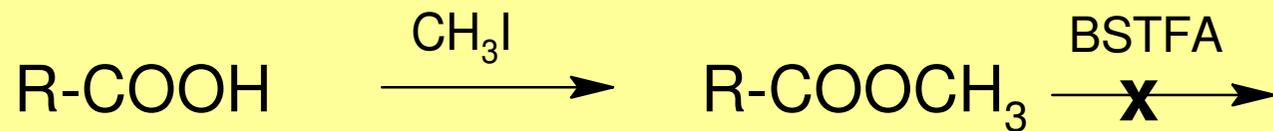
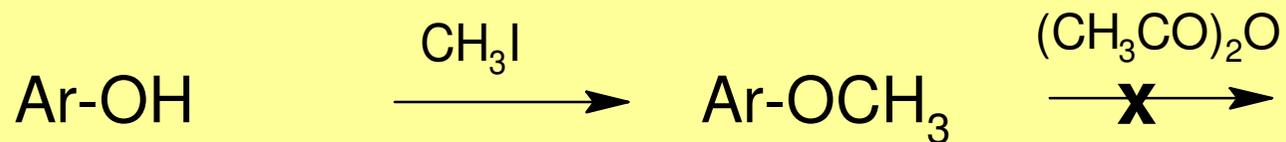
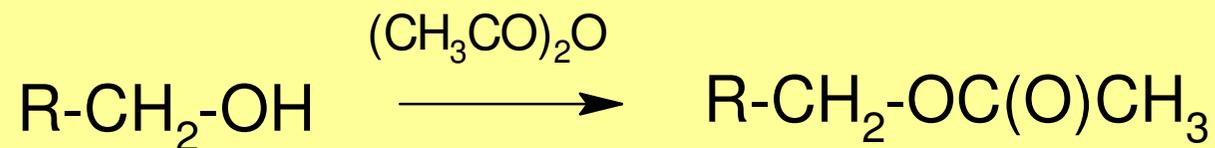
Вещества основного и
амфотерного характера



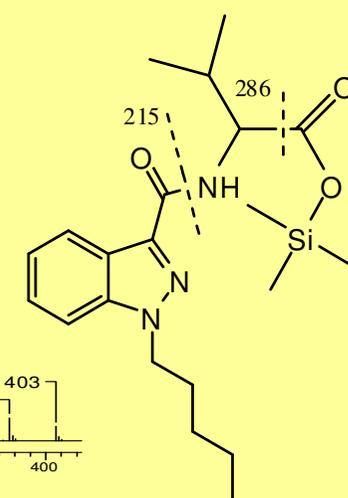
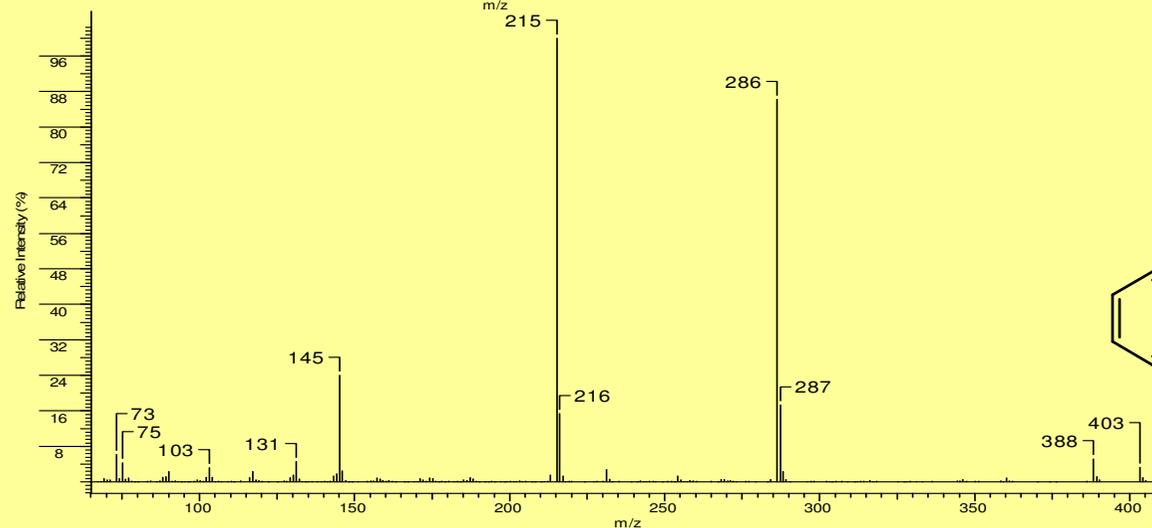
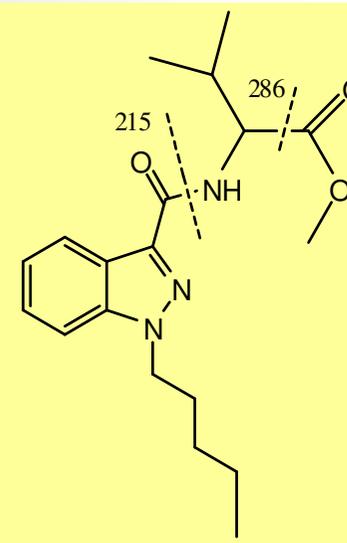
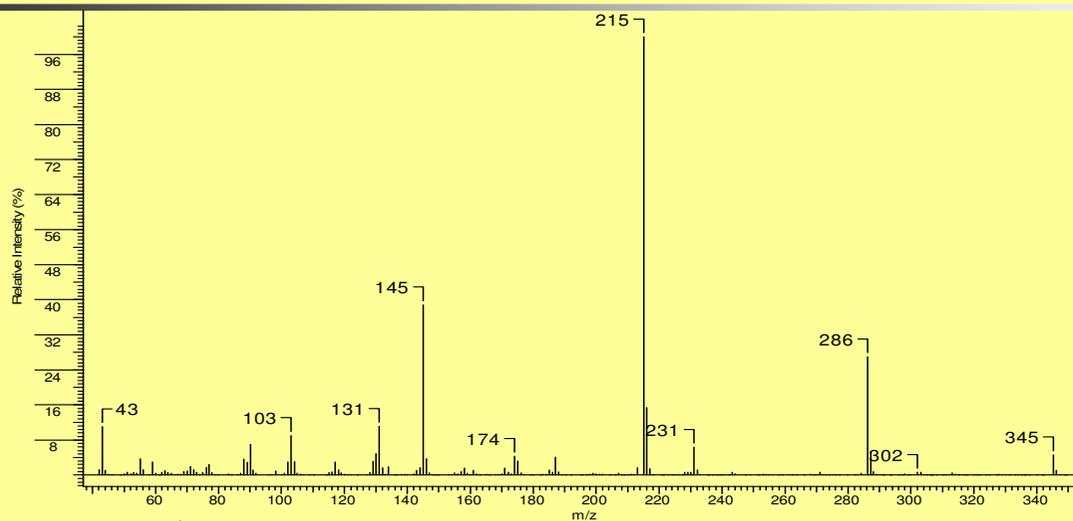
**Физико-химические свойства
и степень конъюгации маркеров
ряда каннабимиметиков**

Маркер	Log <i>P</i>	Кос (pH=4.8)	n	Конъюгация, % (медиана, %)
PВ-22	4.34	1030.5	4	81 – 100 (98)
PВ-22F	3.56	372.0	12	80 – 100 (95)
8-оксихинолин	1.87	1.83	16	19 – 100 (98)
AB-PINACA	3.17	49.16	5	53 – 89 (66)
AB-FUBINACA	2.81	30.15	5	18 – 96 (88)
AB-CHMINACA	3.64	88.5	3	78 – 91 (88)

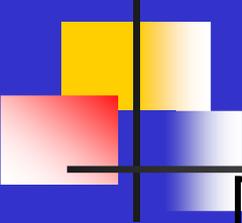
Дериватизация



Сравнение спектров метилового и триметилсилилового эфиров маркера АВ-PINACA



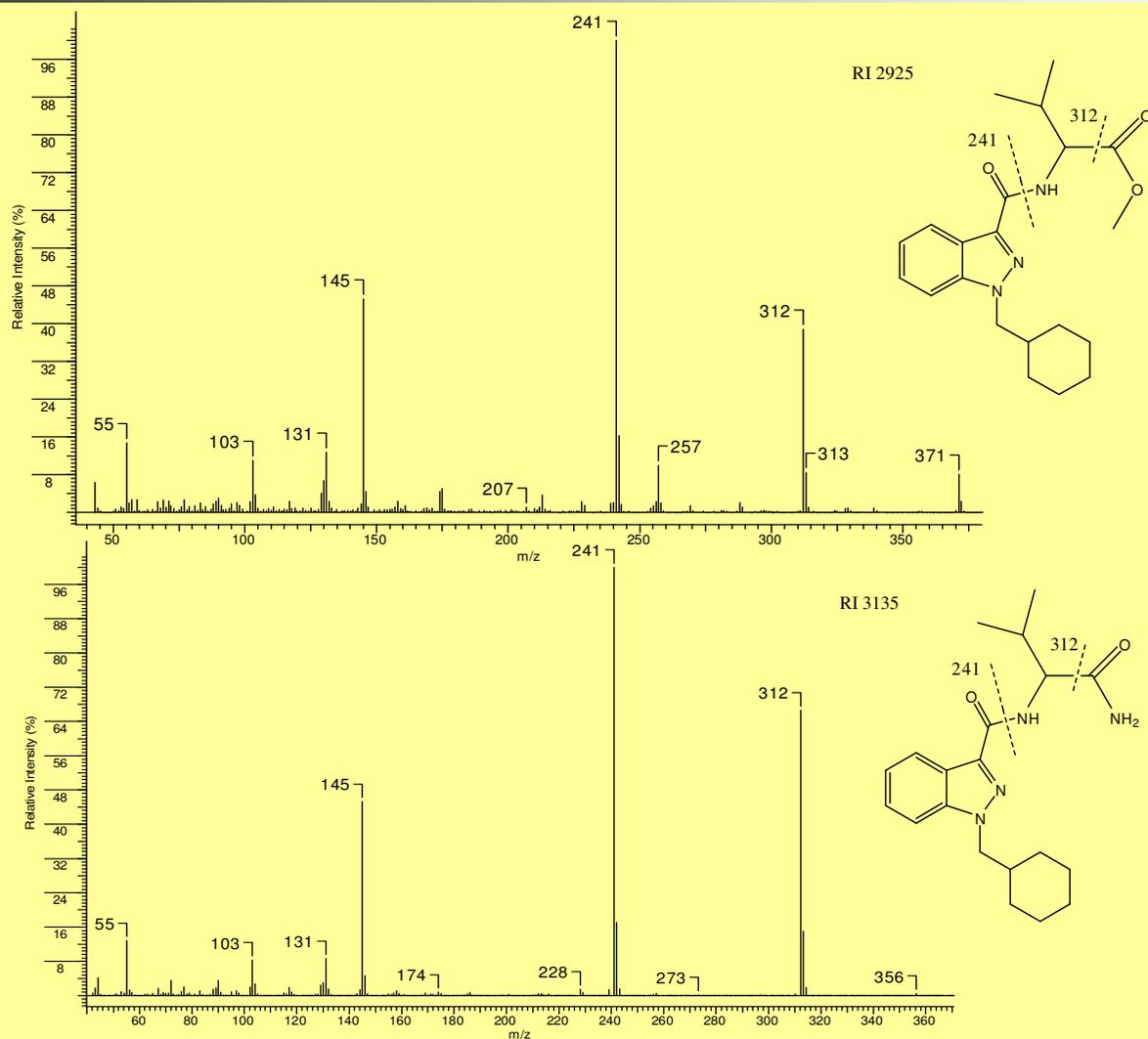
Параметры удерживания метиловых эфиров маркеров каннабимиметиков



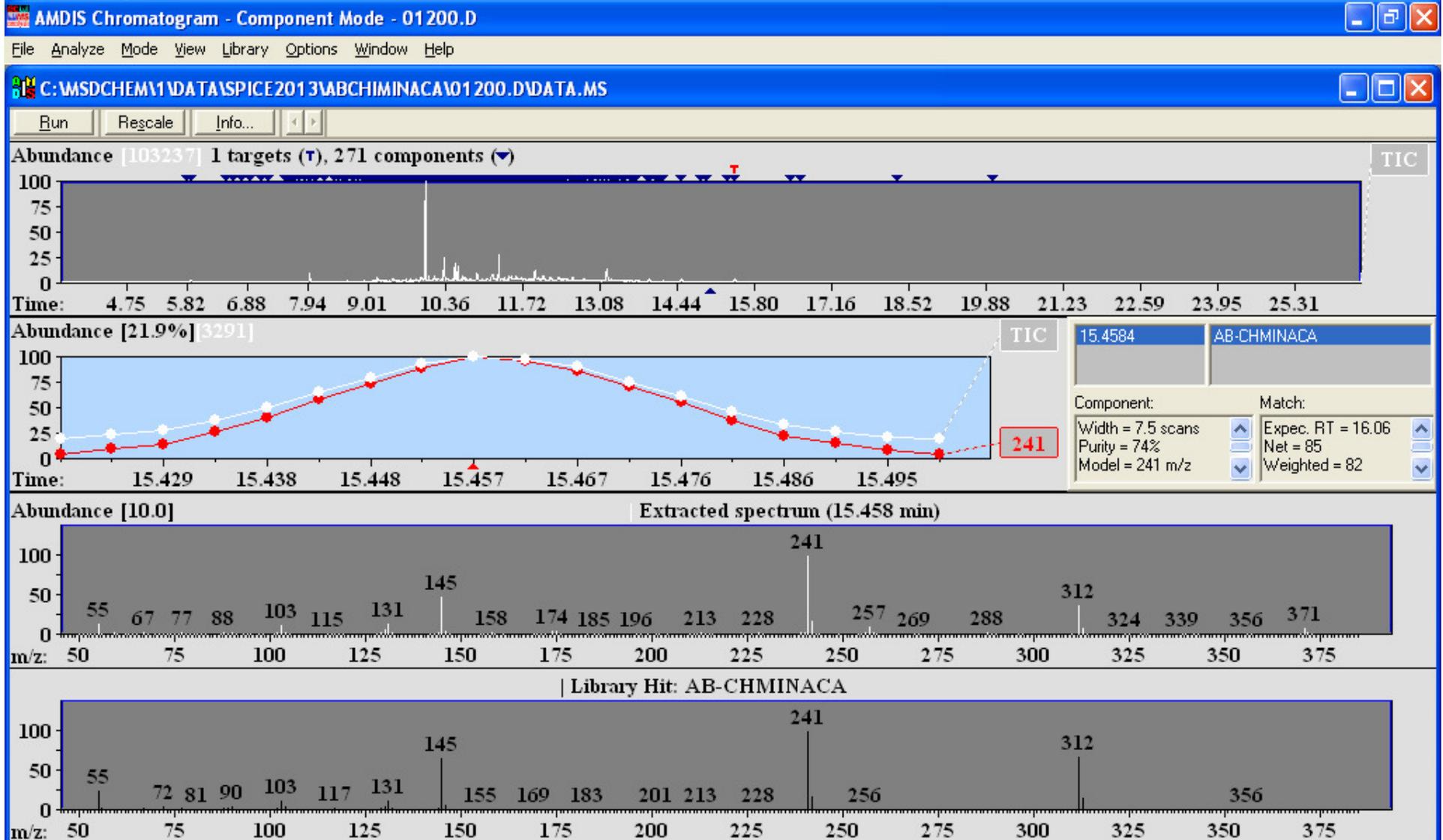
Соединение	t _{уд} , мин	RI
PВ-22 маркер, Me	11,35	2142
PВ-22F маркер, Me	11,88	2261
BВ-22 маркер Me	12,62	2435
FUB-PВ-22 маркер, Me	12,66	2445
AB-PINACA маркер, Me	13,53	2630
5F-AB-PINACA маркер, Me	14,11	2735
AB-CHMINACA маркер, Me	15,46	2925
AB-FUBINACA маркер, Me	15,53	2930

Колонка HP-5MS 30 м X 0,25 мм. Скорость потока газа-носителя (гелий) через колонку 1.5 мл/мин. Температура испарителя хроматографа и интерфейса детектора 250 и 280 гр. С. Температура колонки: 70 гр. С (2 мин), прогрев 20 град/мин до 280 гр. С (8 мин).

Сравнение спектров метилового маркера AB-CHMINACA и AB-CHMINACA



AMDIS



Иммуноанализ

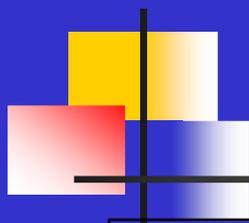
(по данным ХТЛ Московского
научно-практического центра наркологии)

Образцов	ИХА (АВОН)	ГХ/МС-МС
3	+	АВ-FUBINACA
1	+/-	АВ-FUBINACA
1	-	АВ-FUBINACA (следы)
4	+	АВ-FUBINACA, АВ-PINACA
4	+/-	АВ-FUBINACA, АВ-PINACA
1	-	АВ-FUBINACA (след), АВ-PINACA
19	-	АВ-PINACA

Порог чувствительности ИХА - бензодиазепины 200 нг/мл

Иммуноанализ

(по данным СХО БСМЭ Пермского края и Челябинской области)



Образцов	ИХА (Narcoscreen)	ГХ/МС
4	+	АВ-FUBINАСА
1	+/-	АВ-FUBINАСА
4	-	АВ-PINАСА
3	-	АВ-СНMINАСА

Порог чувствительности ИХА - бензодиазепины 300 нг/мл

Образцов	ИХА (Мед-экспресс-диагност.)	ГХ/МС
1	+/-	АВ-FUBINАСА
10	-	АВ-FUBINАСА

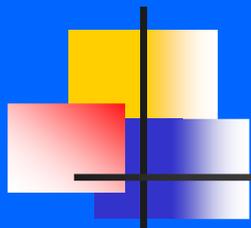
Порог чувствительности ИХА - бензодиазепины 300 нг/мл

Форум Судебных Медиков (ФСМ)

sudmed.ru

Домой Индекс Содержимое Поиск Глоссарий Справка В начало Предыдущая Следующая Последняя Вверх Авторские права Автор

» Судебно-медицинская криминалистика Обсуждение вопросов судебно-медицинской криминалистики	193	3 468	1.10.2013 - 11:50 Тема: Экспертиза по Rq снимкам в МКО Автор: Клокин
» Судебно-медицинская генетика Обсуждение вопросов молекулярно-генетических исследований в судебной медицине	204	1 640	30.09.2013 - 04:36 Тема: Вопрос по родству на основан... Автор: Света2013
» Аналитическая и судебная токсикология Судебная химия — подфорумы: Выявление современных наркотических и психотропных веществ	390	5 002	27.09.2013 - 21:26 Тема: помогите с экспертизой Автор: D'ng
» Социальная и правовая защищенность судебно-медицинских экспертов Страхование, социальные гарантии, пенсии, льготы в судебно-медицинской экспертизе	54	2 188	5.07.2013 - 16:42 Тема: "Земской доктор" и СМЭ Автор: andron15111987
» Съезды, конгрессы, конференции и совещания судмедэкспертов Анонсы, отчеты и обсуждения	81	629	30.09.2013 - 15:25 Тема: 1-ая научно-практическая ко... Автор: Гермиона
» Судебно-медицинская казуистика Редкие и интересные случаи из практики судебно-медицинских экспертов	69	1 009	13.09.2013 - 12:45 Тема: Нелепые смерти. Автор: fbc_v
» Судебно-медицинская библиотека — подфорумы: авторефераты диссертаций , рефераты по судебной медицине , книжный магазин , предложения к авторам публикаций	435	1 660	1.10.2013 - 14:41 Тема: Установление расположения в... Автор: Mafiozo
» Полезные ссылки в интернете Ссылки на полезные сайты — подфорумы: общество судебных медиков Удмуртии	57	458	29.08.2013 - 16:13 Тема: Новый номер журнала Автор: Alex272



**СПАСИБО
ЗА
ВНИМАНИЕ**