



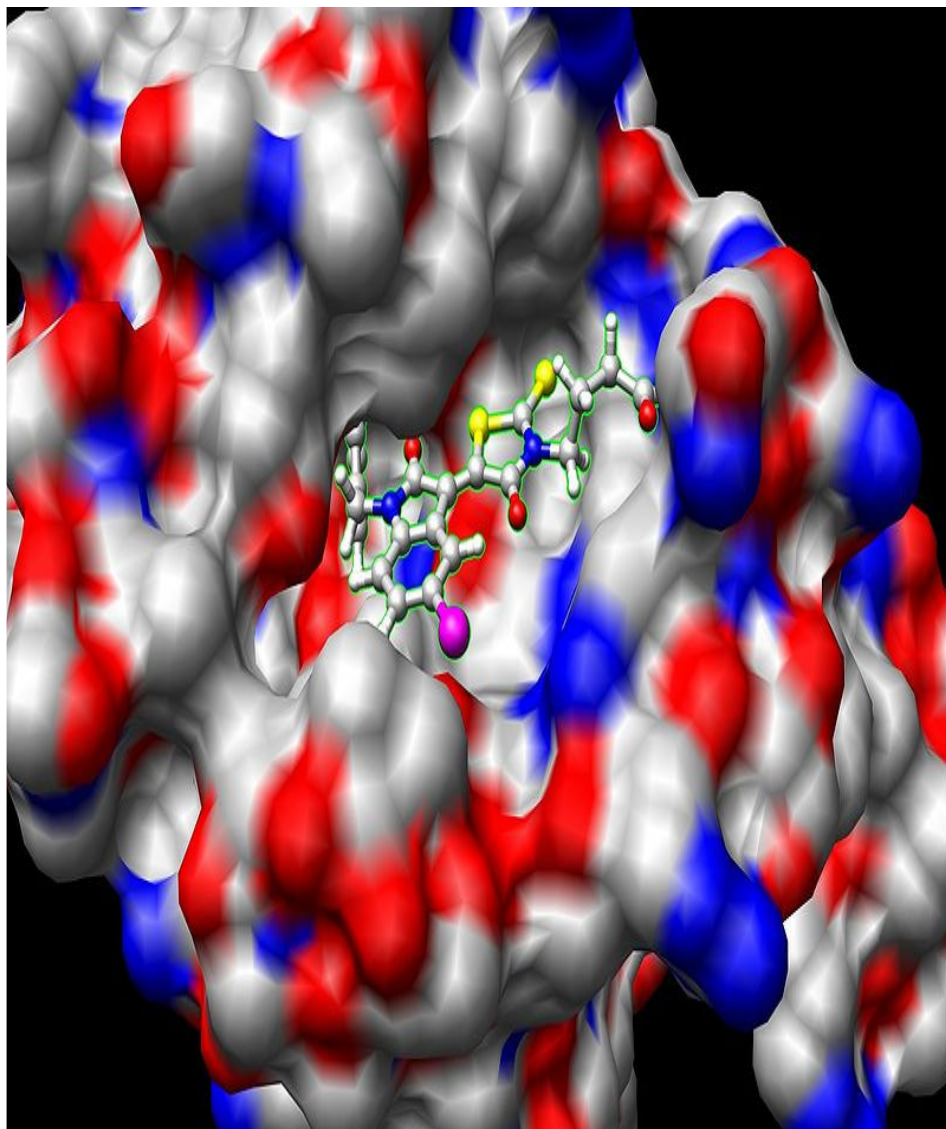
## ОПЫТ ПРИЗНАНИЯ НОВЫХ КАННАБИМИМЕТИКОВ АНАЛОГАМИ НАРКОТИЧЕСКИХ СРЕДСТВ

Ю.А. Джурко<sup>1</sup>, Л.Н. Шитов<sup>1</sup>, М.Б.Ершов<sup>1</sup>, А.Н.Смирнов<sup>2</sup>

1) ГБУЗ ЯО «Ярославская областная клиническая  
наркологическая больница», г. Ярославль

2) Экспертно-криминалистический центр УМВД РФ  
по Костромской области, г. Кострома

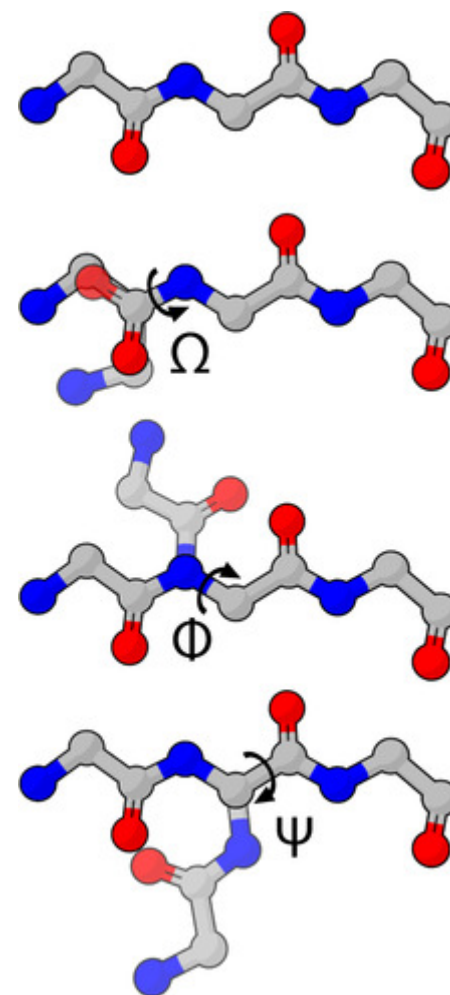
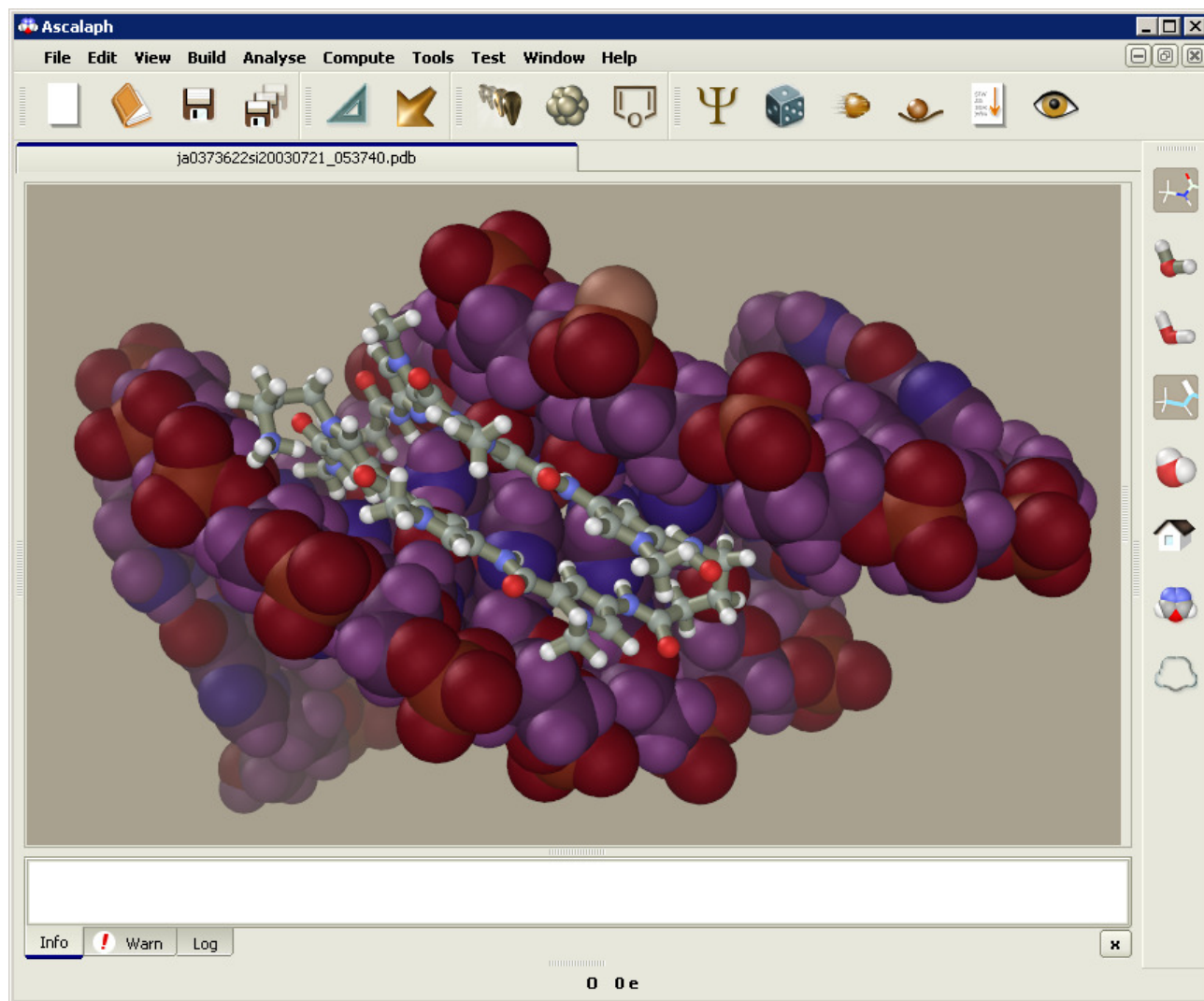




# Designer drugs

Вещества, синтезированные на основании результатов молекулярного моделирования химических структур, способных взаимодействовать с биологическими мишенями (рецепторами) аналогично классическим наркотическим средствам

# Molecular design software





## Фенилэтиламины

Схожи с: фенилэтиламин

### 2C-X

Схожи с: мескалин

|          |        |
|----------|--------|
| 2C-B     | 2C-D   |
| 2C-I     | 2C-P   |
| 2C-E     | 2C-T-x |
| 2C-B-FLY |        |

### Психоделические амфетамины (DO x)

Схожи с: 2C-x, амфетамин

|                 |      |
|-----------------|------|
| DOB             | DOM  |
| DOC             | DON  |
| DOI             | DOET |
| Bromo-DragonFLY |      |

### β-кетоны

Схожи с: катиноны, MDMA, амфетамины

|                   |           |
|-------------------|-----------|
| Мефедрон          | Бутилон   |
| Метилон           | Флефедрон |
| Метедрон          | МДПВ      |
| Нафтилпировалерон |           |

### Циклические амфетамины

Схожи с: MDMA, амфетамины

|       |       |
|-------|-------|
| 2-AI  | 2-AT  |
| MDAI  | MDAT  |
| MDMAI | MDMAT |
| MMAI  |       |

## Триптамины

Схожи с: псилоцин, DMT, серотонин

### 5-замещенные

Схожи с: псилоцин, серотонин

|            |            |
|------------|------------|
| 5-MeO-DMT  | 5-MeO-DALT |
| 5-MeO-MIPT | 5-MeO-MET  |
| 5-MeO-DIPT | 5-MeO-DPT  |
| 5-MeO-AMT  |            |
| 5-MeO-AET  |            |

NMT  
DET  
DPT

### 4-замещенные

Схожи с: псилоцин

|           |           |
|-----------|-----------|
| 4-AcO-DMT | 4-HO-DPT  |
| 4-AcO-DET | 4-HO-DALT |
| 4-HO-MIPT | 4-HO-DIPT |
| 4-MES-DMT |           |

MIPT DALT  
DIPT  
AMT  
AET

## Пиперазины

Схожи с: пиперазин

|       |       |
|-------|-------|
| BZP   | mCPP  |
| MBZP  | pFPP  |
| DBZP  | MeOPP |
| MDBZP | TFMPP |

## Опиаты

α-метилфентанил  
3-метилфентанил  
пара-флюорофентанил  
MPPP  
O-дезметилтрамадол  
7-Ацетоксимитрагинин

## Синтетические каннабиноиды

Схожи с: естественными каннабиноидами

CP-47,497  
CP-55,940

WIN-55,212-2

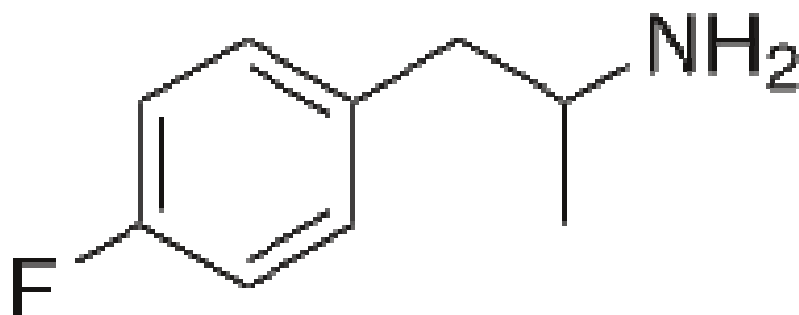
### Семейство JWH

|         |         |
|---------|---------|
| JWH-017 | JWH-73  |
| JWH-018 | JWH-81  |
| JWH-019 | JWH-200 |
| JWH-250 |         |

HU-210

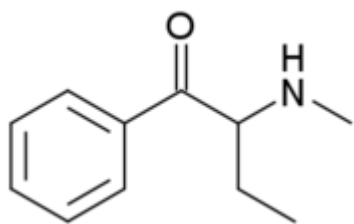
CB-25  
CB-52

# Amphetamine-based designer drugs



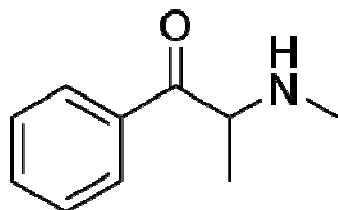
4-fluoroamphetamine

**Buphedrone**



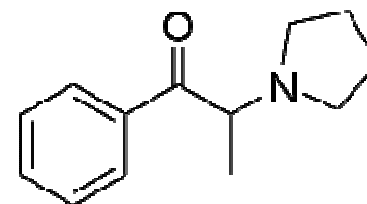
$\alpha$ -methylamino-butyrophenone

**Ethcathinone**



ethylpropion

**$\alpha$ -PPP**

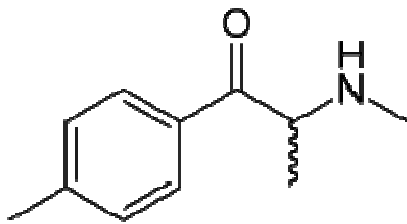


$\alpha$ -pyrrolidinopropiophenone

# Methcatinones:

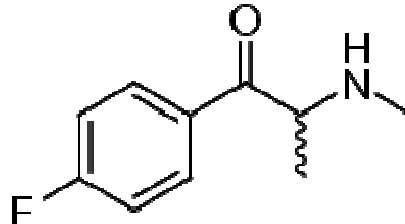
dopamine-norepinephrine-serotonin  
reuptake inhibitors

**Mephedrone**



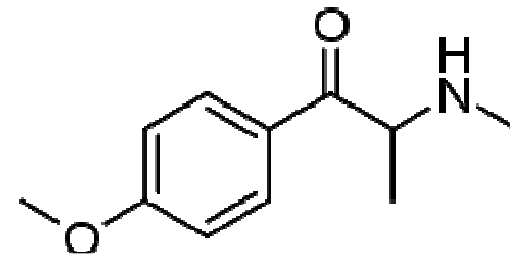
4-methylmethcathinone

**Flephedrone**



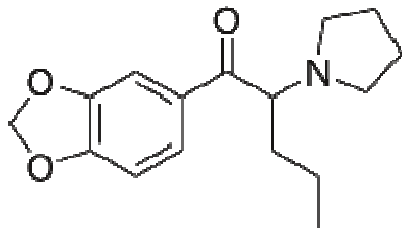
4-fluoromethcathinone

**Methedrone**



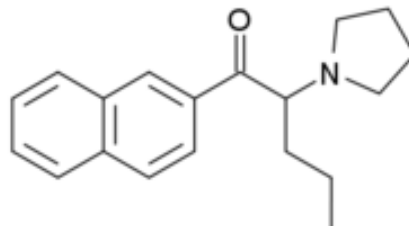
4-methoxymethcathinone

**MDPV**



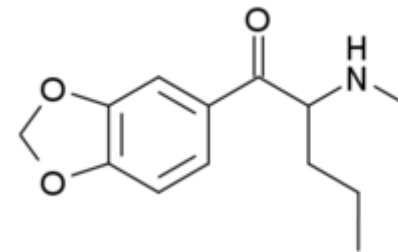
methylenedioxypropylvalerone

**Naphyrone**



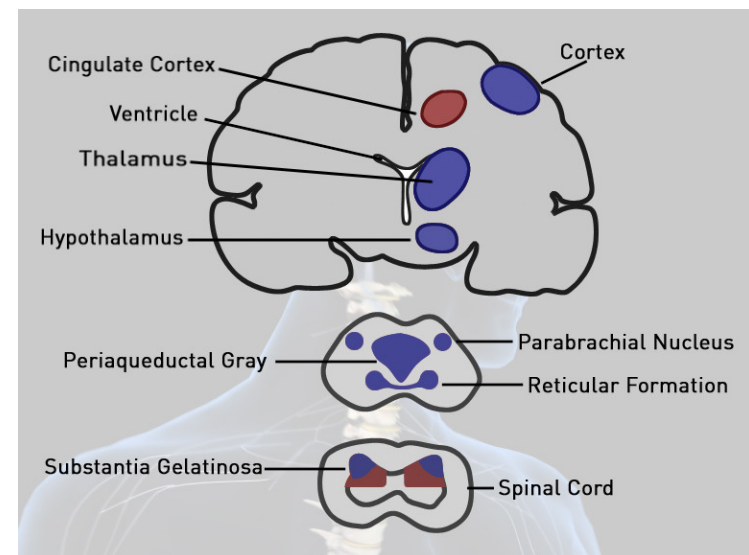
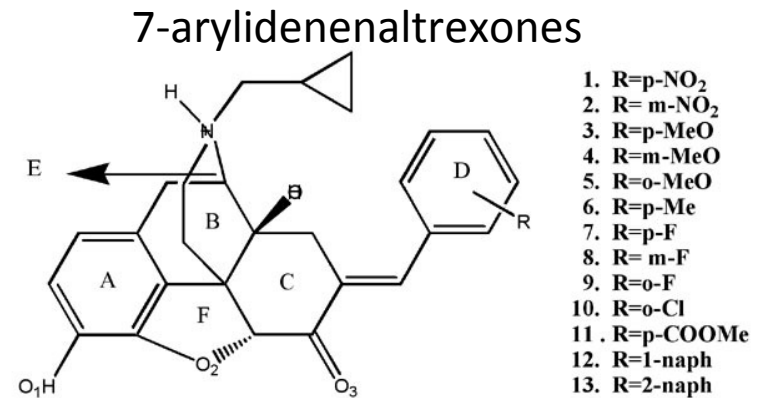
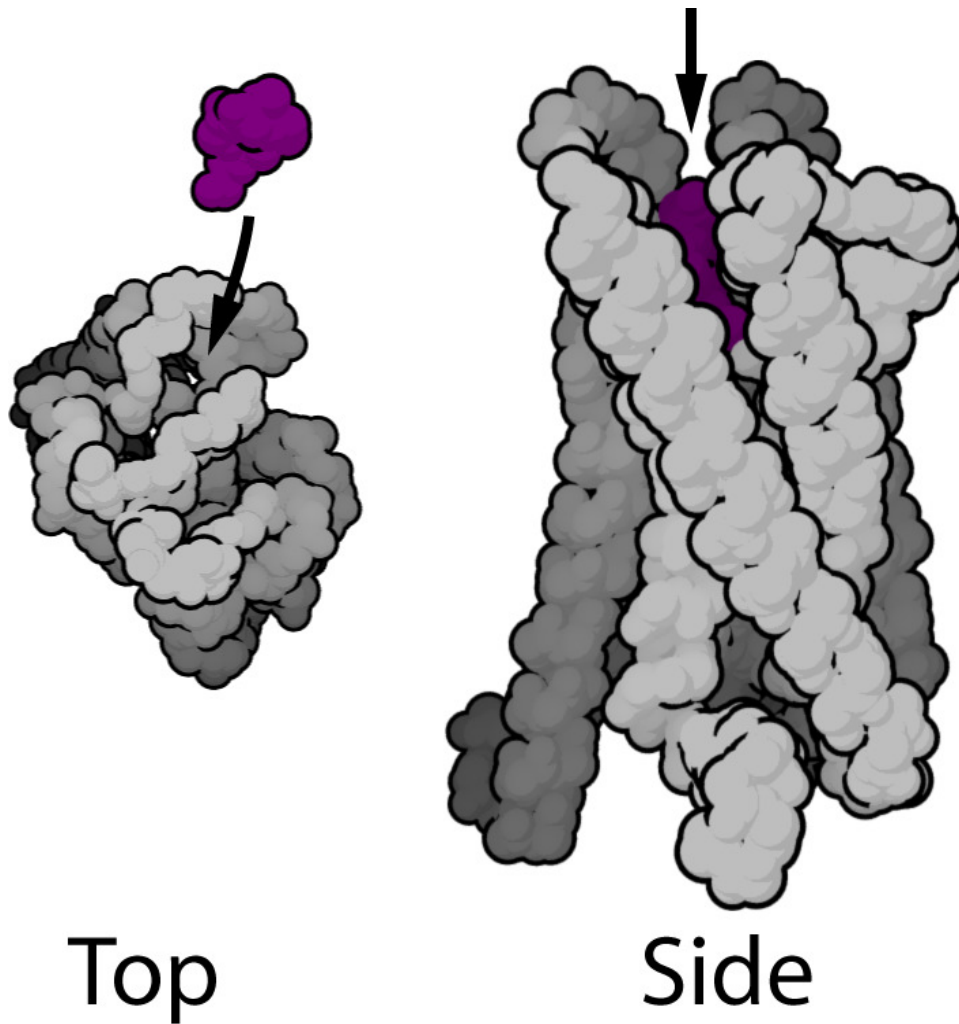
naphthylpyrrolone

**Pentylone**

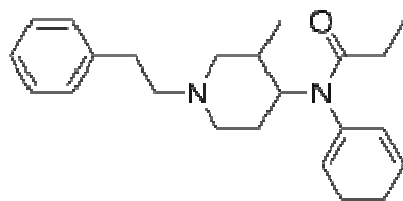


$\beta$ -Keto-Methylbenzodioxolylpentane

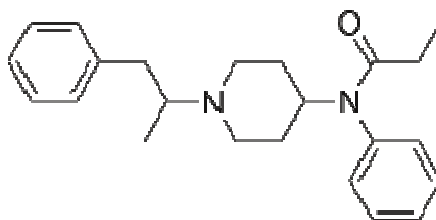
# Opioids - Mu-opioid receptor ligands



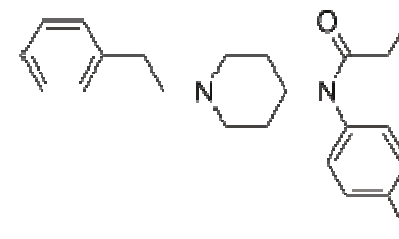
# Opioids - Mu-opioid receptor agonists



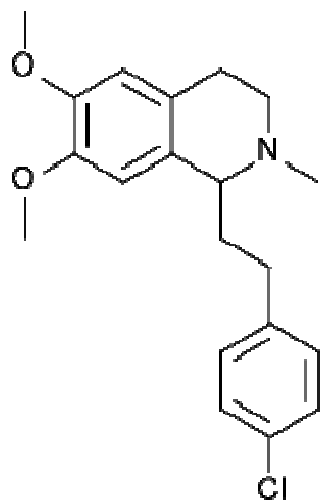
3-Methylfentanyl



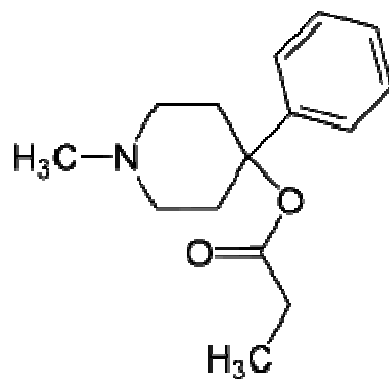
α-Methylfentanyl



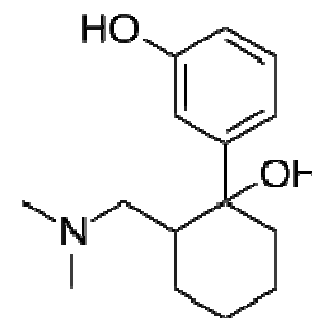
Para-fluorofentanyl



Methopholine



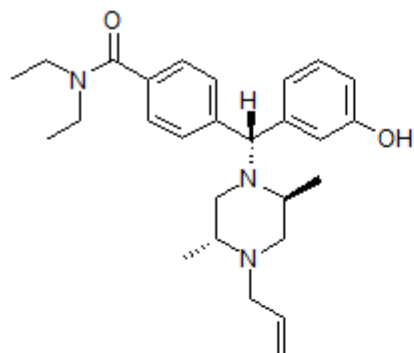
MPPP  
(Desmethyprodine)



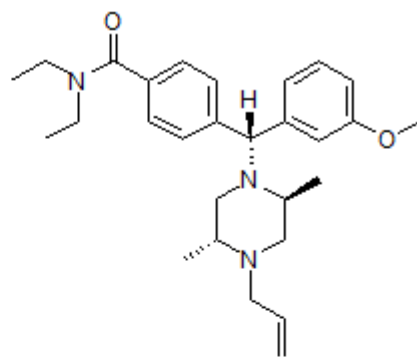
O-Desmethyldramadol



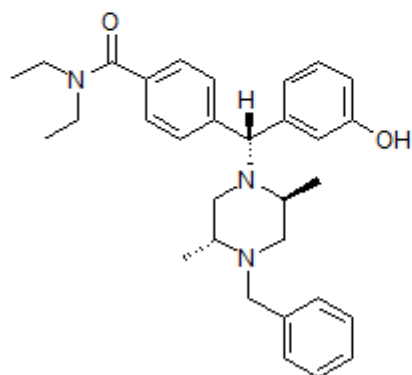
# Mu-opioid receptor agonists



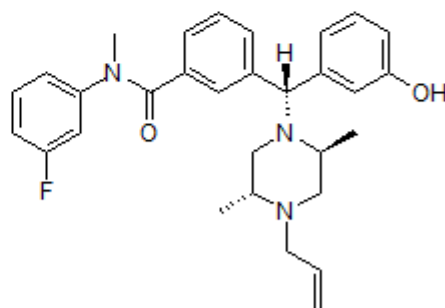
BW373U86 - selective delta agonist  
convulsions at >3.2mg/kg



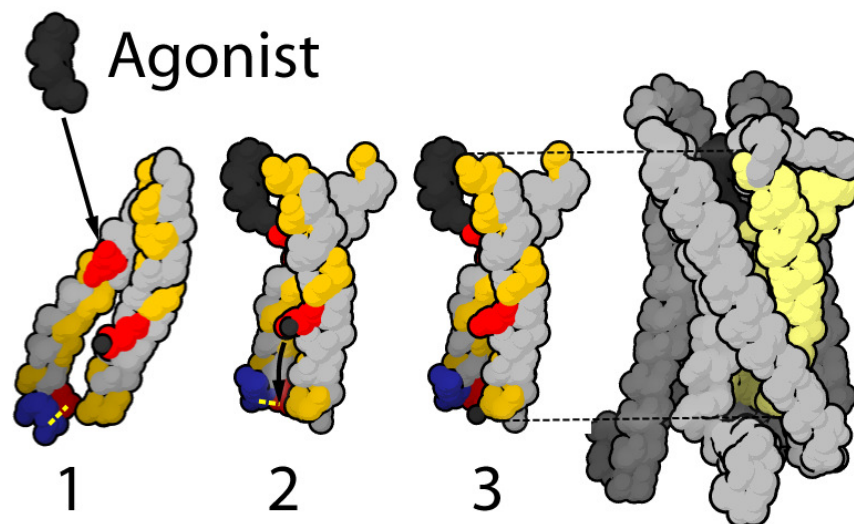
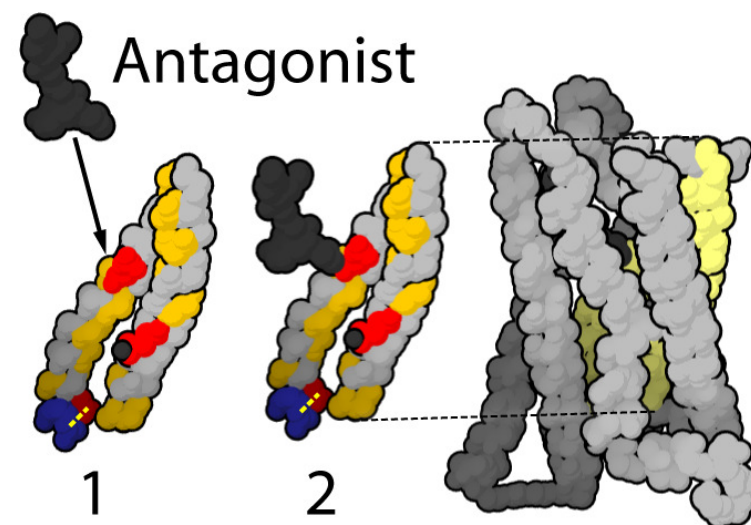
SNC-80 - selective delta agonist  
convulsions at >10mg/kg



DPI-287 - selective delta agonist  
no convulsions even at 100mg/kg



DPI-3290 - mixed mu/delta agonist  
affinity  $\delta$  1.0,  $\mu$  6.5,  $\kappa$  25 nM  
analgesic at 0.05mg/kg

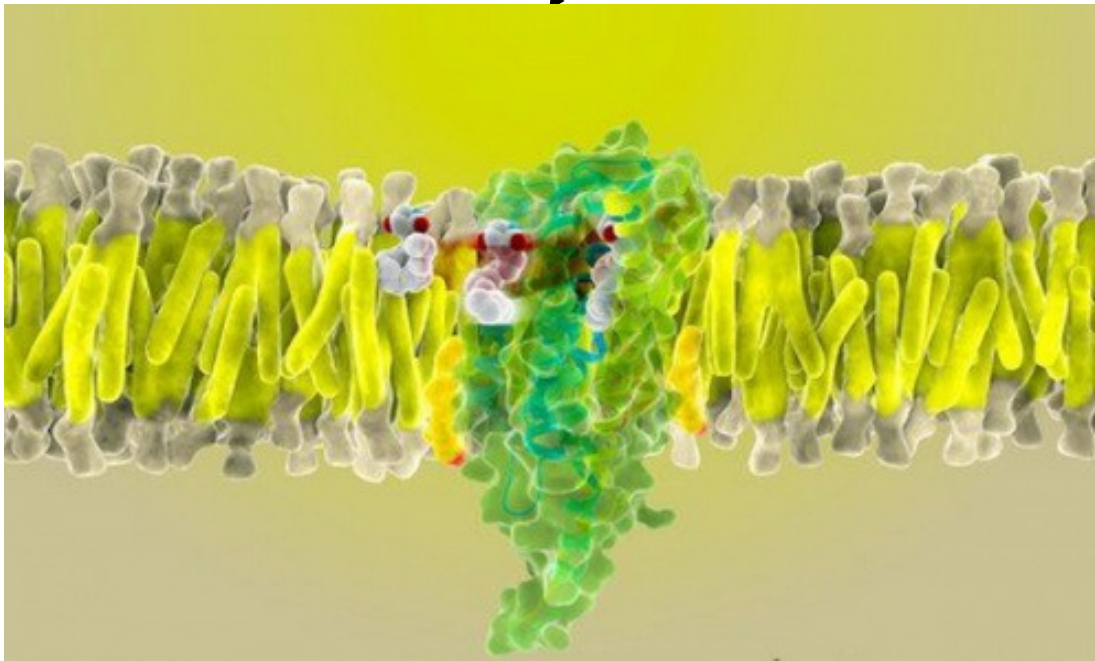


# Каннабиноидные рецепторы млекопитающих:

**CB<sub>1</sub>** (центральная и периферическая нервная система)

**CB<sub>2</sub>** (селезенка, поджелудочная железа, иммунокомпетентные клетки)

лиганд

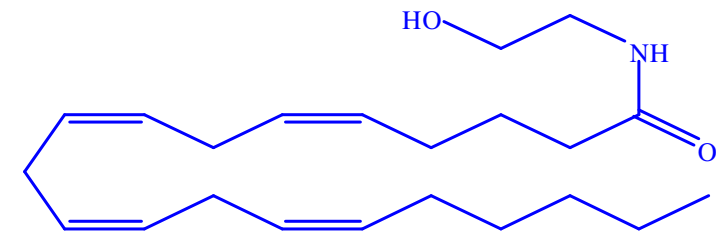


клеточная мембрана

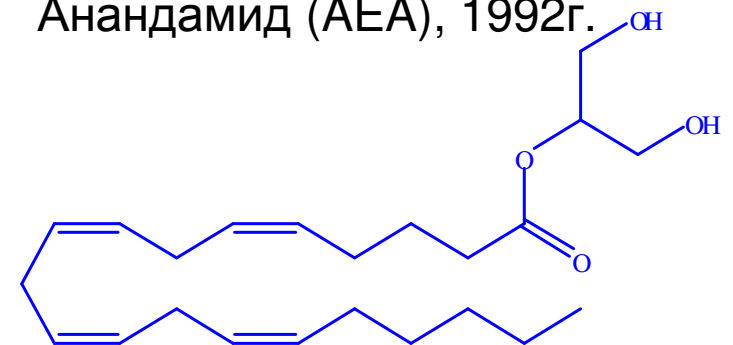
## Каннабимиметики:



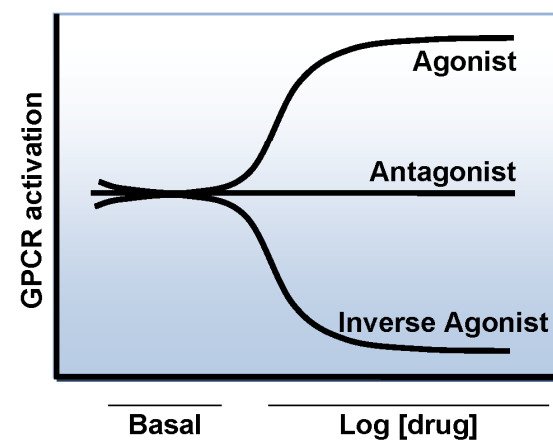
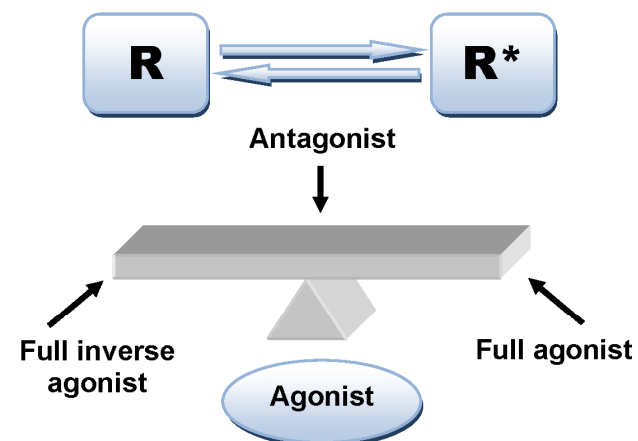
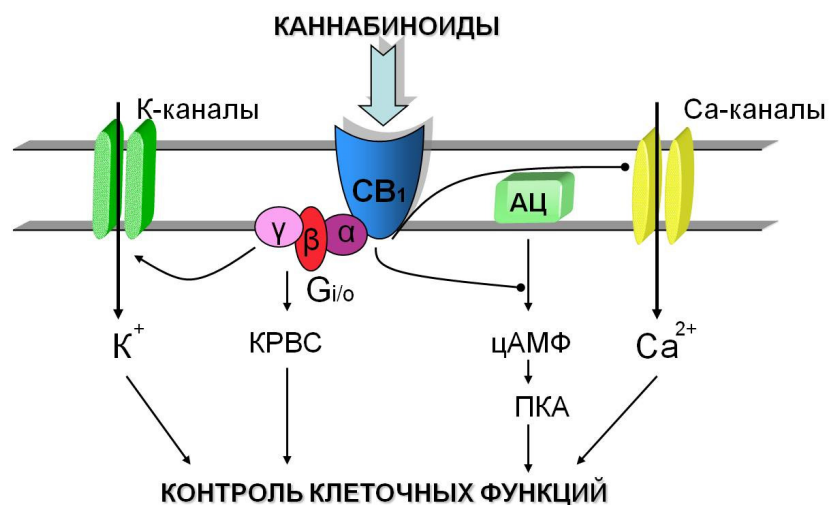
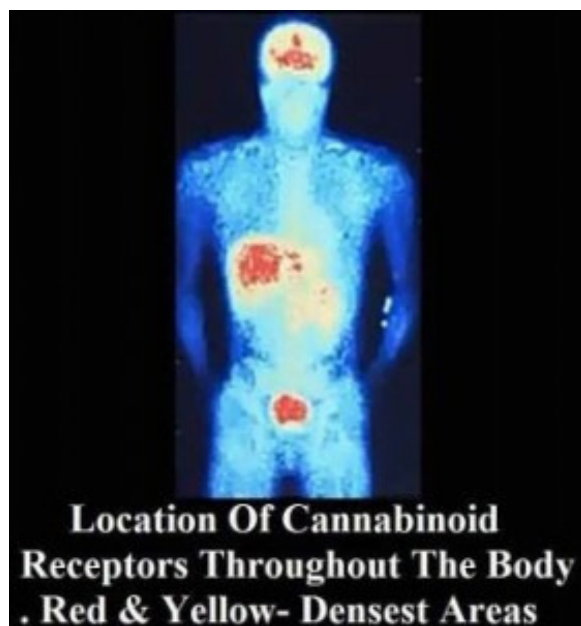
## Эндогенные каннабиноиды:



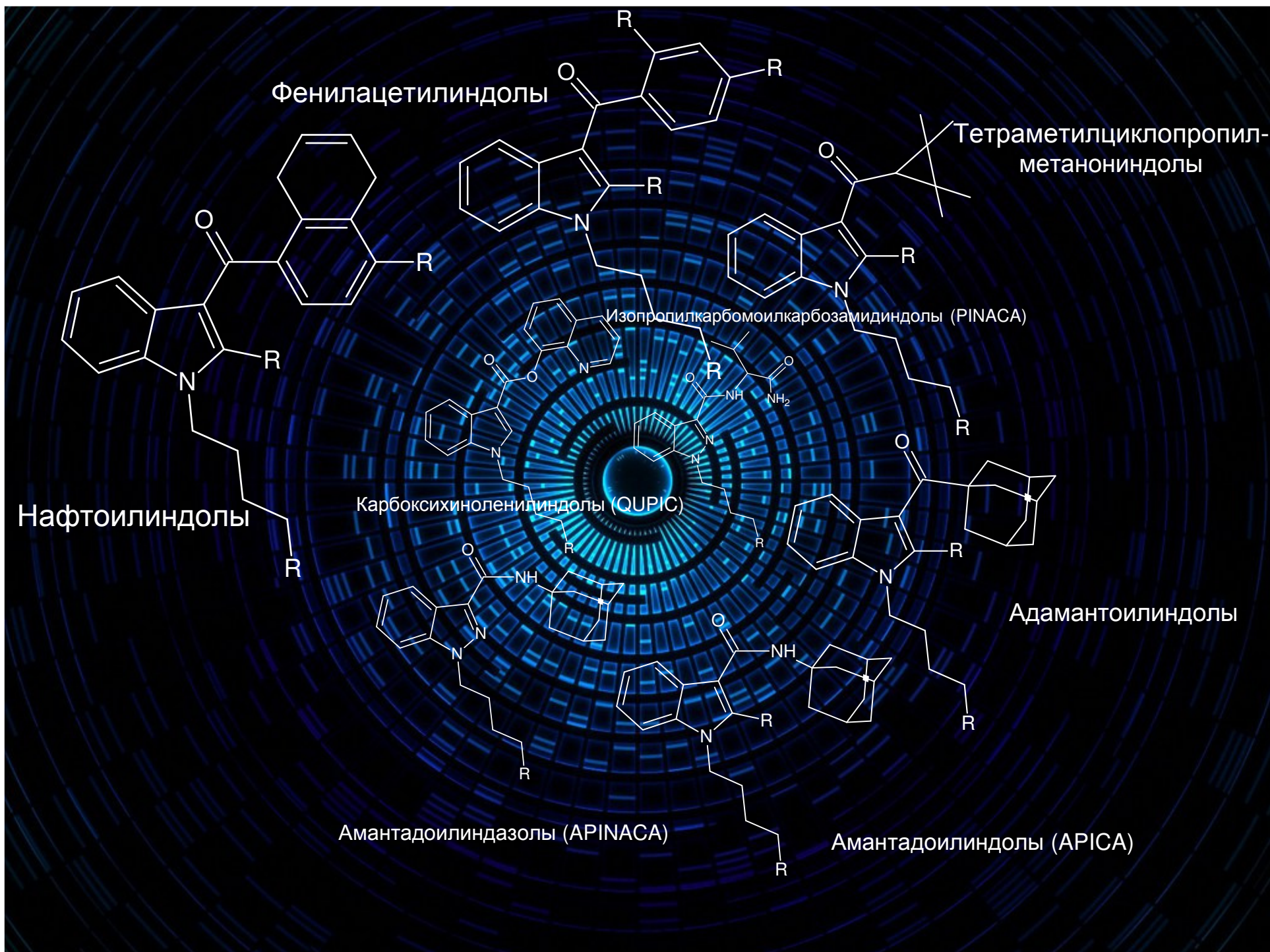
Анандамид (AEA), 1992г.



2-Арахидоноглицерин (2-AG)

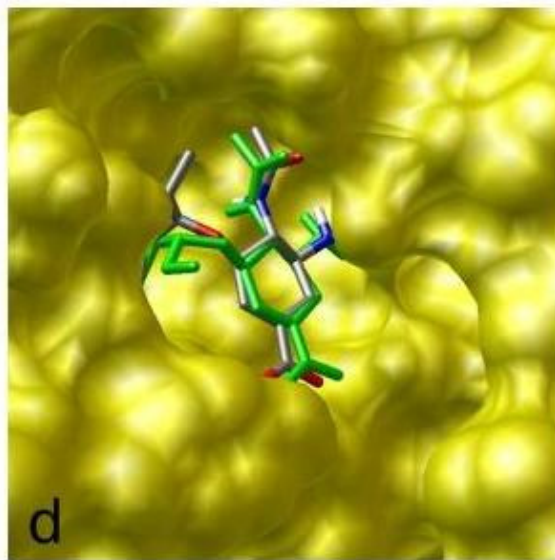
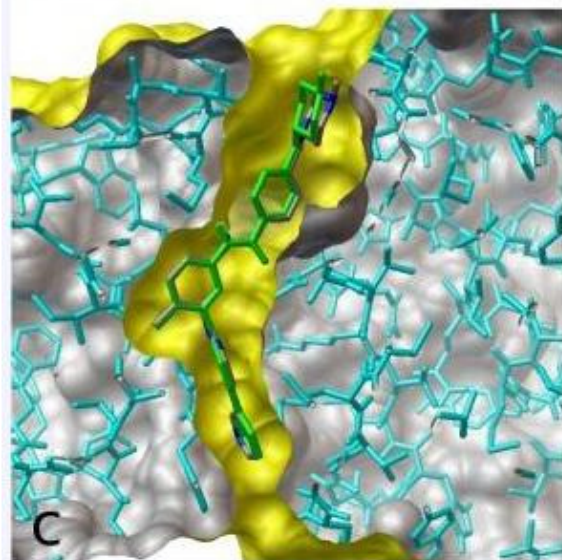
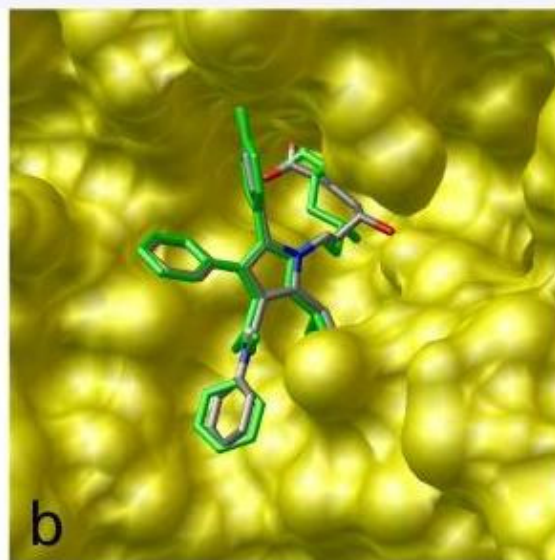
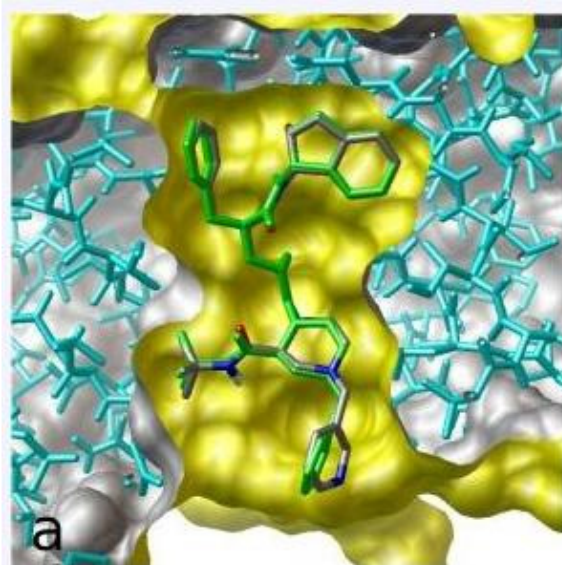








## AutoDock Vina – программа для изучения межмолекулярного взаимодействия

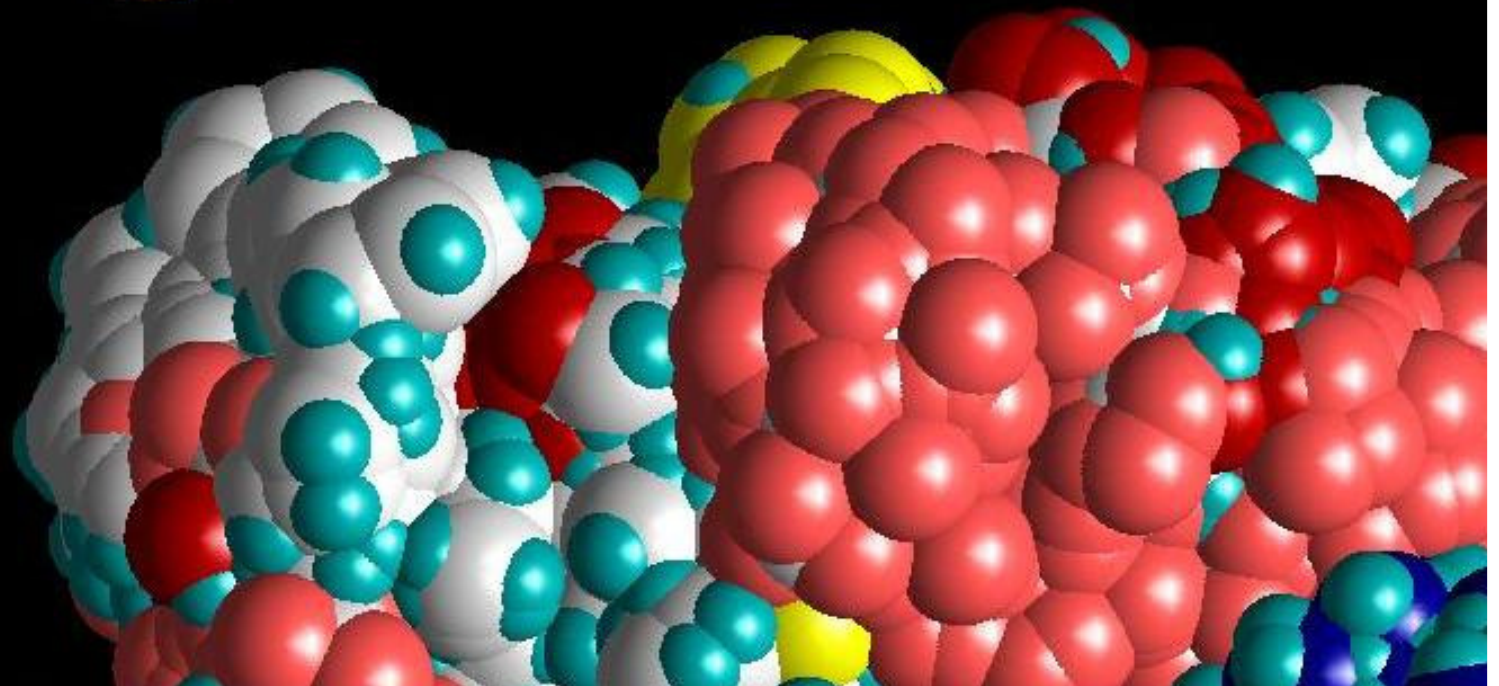
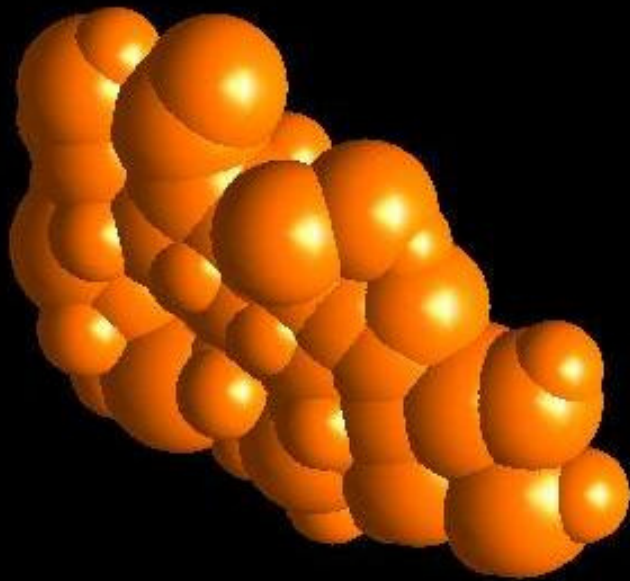


### AutoDock Vina

AutoDock Vina is an open-source program for doing [molecular docking](#). It was designed and implemented by [Dr. Oleg Trott](#) in the Molecular Graphics Lab at The Scripps Research Institute.

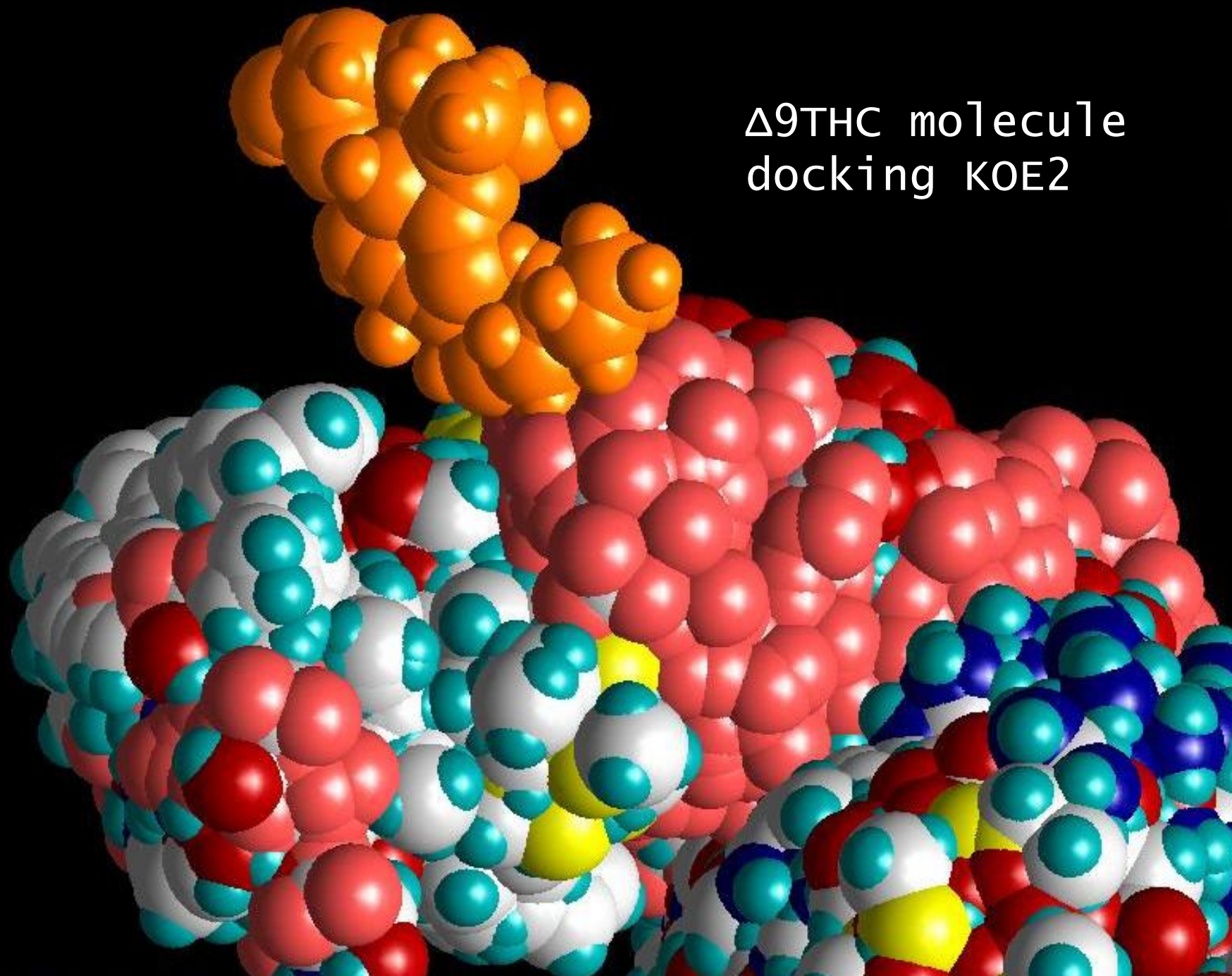
The image on the left illustrates the results of flexible docking (green) superimposed on the crystal structures of (a) indinavir, (b) atorvastatin, (c) imatinib, and (d) oseltamivir bound to their respective targets.

Doxycycline molecule –  
no docking

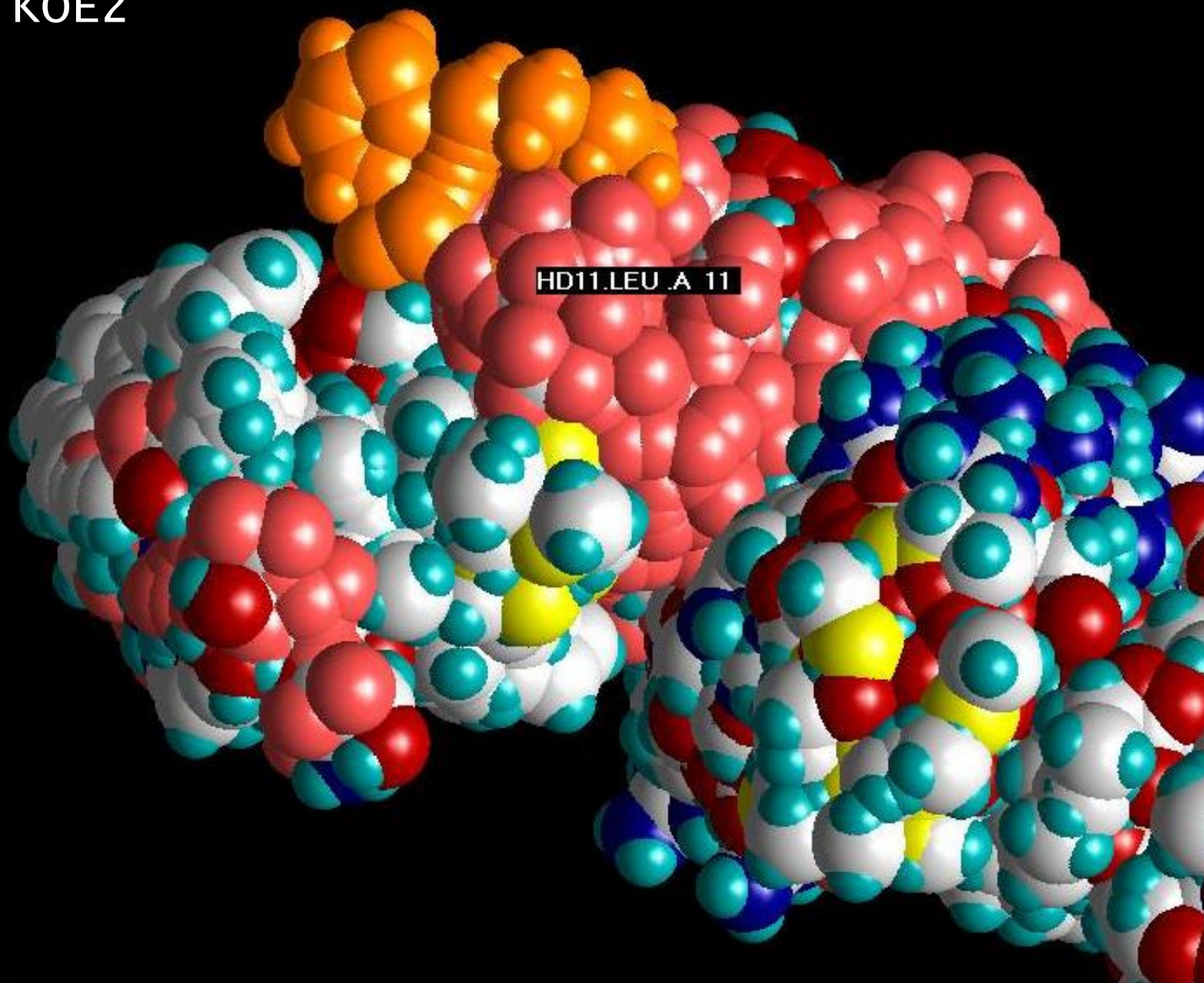




$\Delta^9$ THC molecule  
docking KOE2

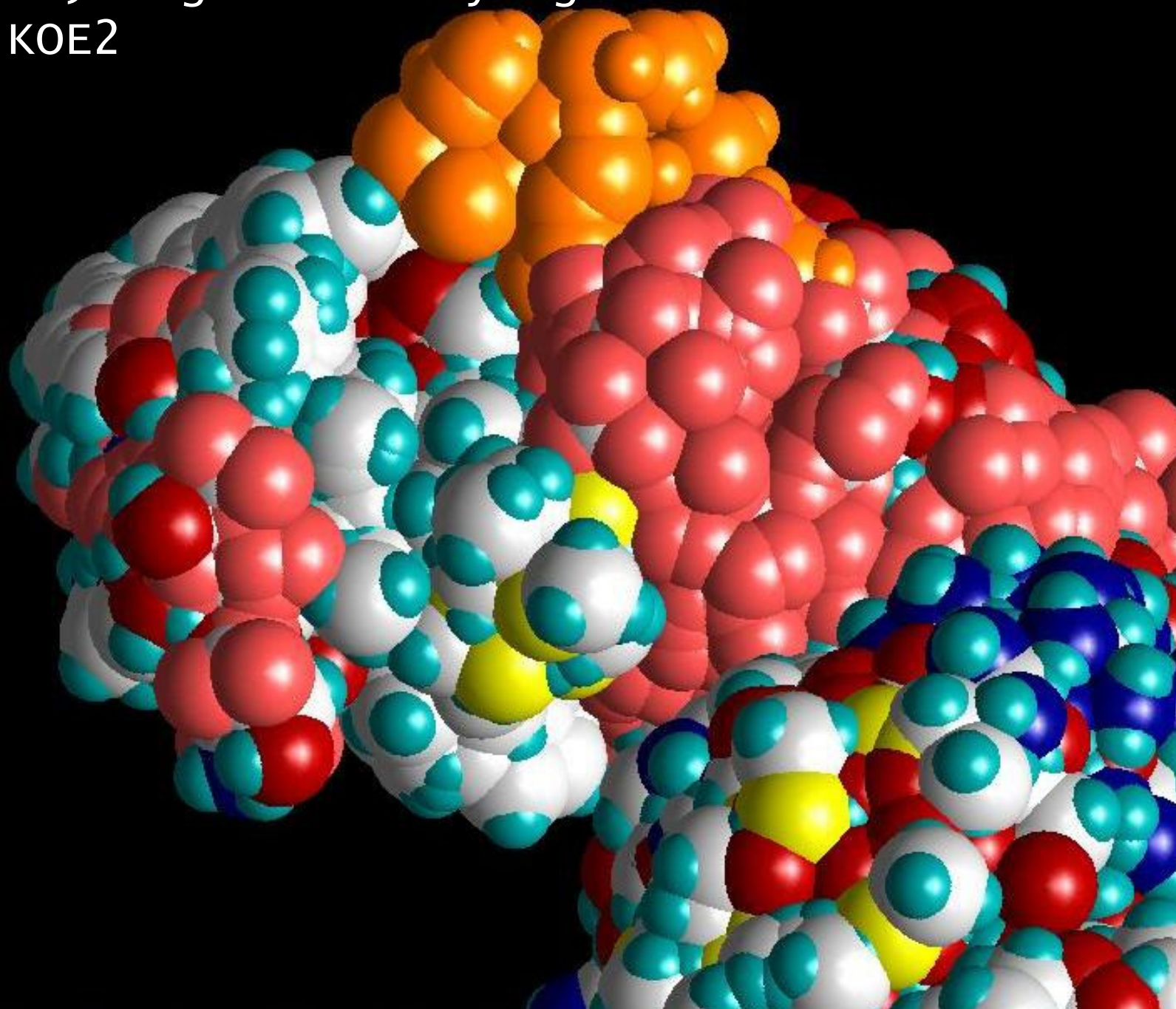


AKB48(APINACA) high affinity agonist molecule  
docking KOE2

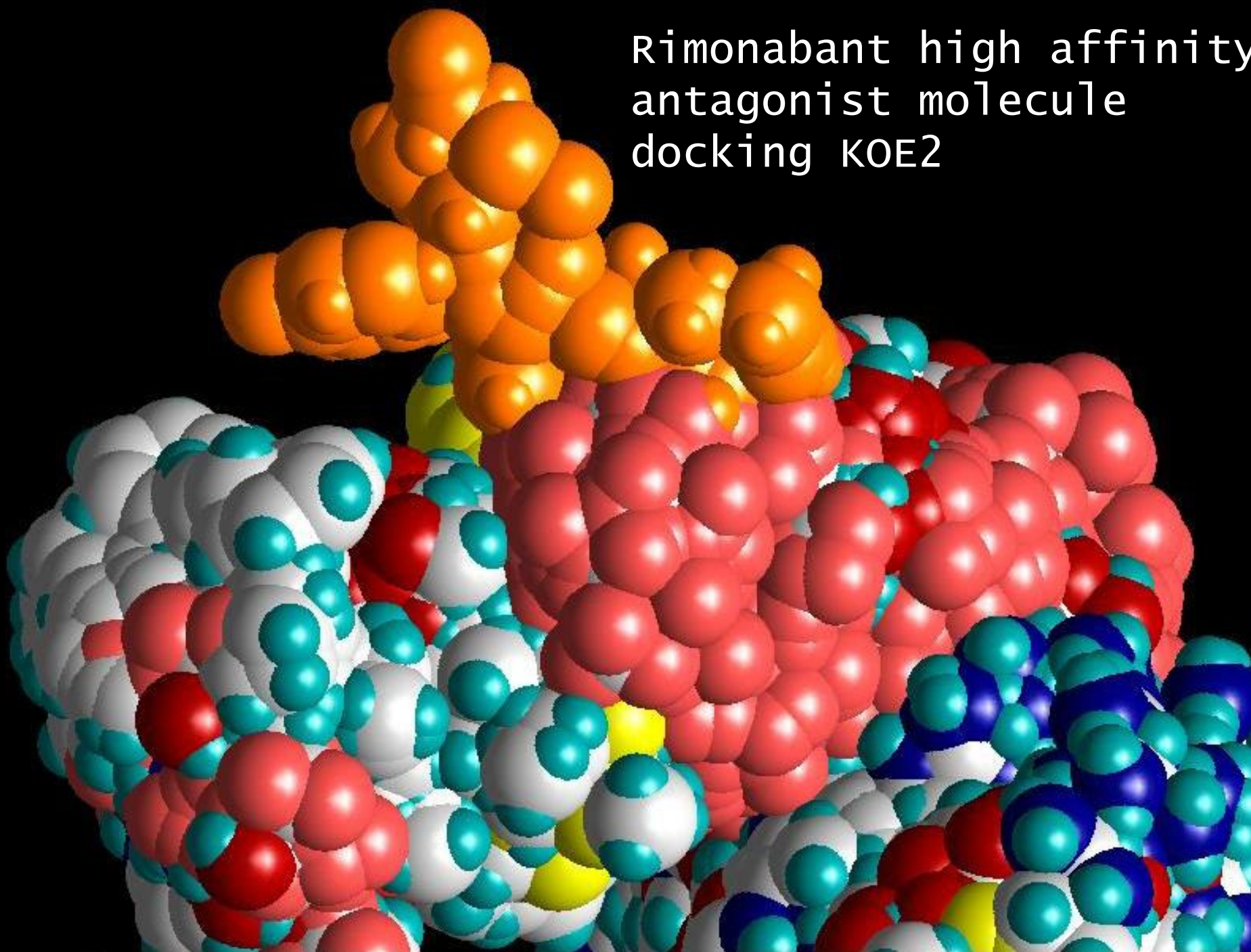




PB22(QUPIC) high affinity agonist molecule  
docking KOE2



Rimonabant high affinity  
antagonist molecule  
docking KOE2



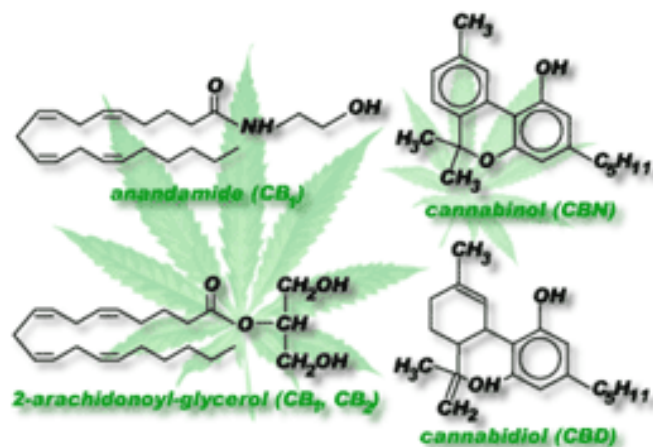
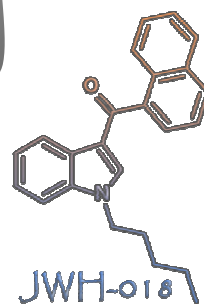
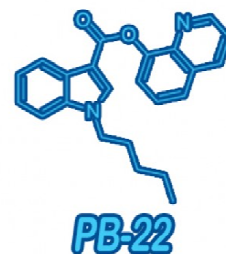


# Вывод:

Программное обеспечение для моделирования межмолекулярного взаимодействия, типа AutoDock Vina, может эффективно использоваться при проведении комплексных экспертиз по признанию новых «дизайнерских наркотиков» аналогами «классических» наркотических средств и психотропных веществ.



Благодарю



за внимание