

Определение хроматомасс-спектрометрических характеристик метаболитов НОВЫХ ПСИХОАКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ, полученных с помощью *in vivo* и *in vitro* методов

**Е.В. Никитин^{1*}, А.М. Григорьев², С.Е. Грибкова¹,
И.А. Родин³, В.А. Калашников¹**

¹ Институт криминалистики Центра специальной техники ФСБ России; 101000, Москва.

² ГБУЗ Московской области «Бюро судебно-медицинской экспертизы», 111401, Москва, 1-ая Владимирская ул., д.33, корп.1.

³ Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3.
nikitin.com@mail.ru

Вследствие многообразия синтетических наркотиков и постоянной модификации их структур, проведение химико-токсикологического анализа биологических объектов криминалистической экспертизы значительно усложняется отсутствием сведений об основных метаболических преобразованиях новых ксенобиотиков, а также хроматомасс-спектрометрических (ХМС) характеристик исходного токсиканта и его биомаркеров. Решение этой задачи позволяет создать скрининговые методики для химико-токсикологического анализа биологических объектов и определять вид токсиканта, попадающего в организм человека.

Эксперимент. В данной работе было проведено сравнение наборов метаболитов синтетического опиоида фуранилфентанила и синтетического каннабимиметика ТМСП-CHMINACA, полученных методами *in vitro* (с применением S9 фракции человеческой печени) и *in vivo* (на лабораторных крысах) для установления основных путей биотрансформации и их различий.

Структурную идентификацию и определение ХМС характеристик метаболитов выполняли методом высокоэффективной жидкостной хроматографии с tandemным масс-спектрометрическим детектированием высокого разрешения.

Результаты. Полученные ХМС характеристики метаболитов исследуемых ксенобиотиков были использованы впоследствии для скринингового исследования биожидкостей людей при проведении химико-токсикологического анализа. В ходе экспертных исследований это позволило выявить факты употребления фуранилфентанила¹ и ТМСП-CHMINACA², а также сопоставить особенности метаболических преобразований исходных соединений в моделях *in vitro* и *in vivo* с мочевыми метаболическими профилями наркозависимых людей.

В целом, метаболиты, полученные *in vitro*, являются продуктами одно- и двух-стадийных трансформаций исходных ксенобиотиков (моногоксилирование, карбоксилирование, N-деалкилирование и гидролиз), а их предполагаемые структуры в наименьшей степени отличаются от структур исходных молекул. Однако, методом *in vitro* не удалось выявить ряд метаболитов (дигидродиольных и некоторых деалкилированных производных) характерных для людей и присутствующих в моче лабораторных крыс.

Литература:

1. Родин И.А., Грибкова С.Е., Григорьев А.М., Никитин Е.В., Калашников В.А. Обнаружение метаболитов нового психоактивного вещества фуранилфентанила в моче и сыворотке крови лабораторных крыс методом жидкостной хроматомасс-спектрометрии // *Масс-спектрометрия*. 2017. Т. 14, № 4. С. 242–251.
2. Никитин Е.В., Григорьев А.М., Лабути А.В., Грибкова С.Е., Родин И.А., Калашников В.А., Ахмеров К.Р. Обнаружение метаболитов нового психоактивного вещества ТМСП-CHMINACA в моче и сыворотке крови лабораторных крыс методом жидкостной хроматомасс-спектрометрии // *Масс-спектрометрия*. 2018. Т. 15, № 3. С. 162–171.