

Определение хроматомасс-спектрометрических характеристик метаболитов новых психоактивных веществ, полученных с помощью *in vivo* и *in vitro* методов

Никитин Е.В.¹, Григорьев А.М.², Родин И.А.³

¹Институт криминалистики Центра специальной техники ФСБ России, г. Москва

²ГБУЗ Московской области «Бюро судебно-медицинской экспертизы», г. Москва

³Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, г. Москва
nikitin.com@mail.ru

Исходя из многообразия синтетических наркотиков, постоянной модификации их структур и динамики выявления новых соединений в незаконном обороте наркотических средств (НС) и психотропных веществ (ПВ), обнаружение продуктов их биотрансформации (метаболитов) и определение их хроматомасс-спектрометрических характеристик является чрезвычайно важной задачей в области химико-токсикологического анализа биологических объектов. Решение этой задачи позволяет определять вид токсиканта, попадающего в организм человека. Ввиду того, что характеристики метаболитов новых НС и ПВ как правило неизвестны, необходима разработка методов получения метаболитов, а также оценка возможностей этих методов.

Эксперимент. В данной работе было проведено сравнение наборов метаболитов синтетических каннабимиметиков (СК) AB-FUBINACA и ADB-FUBINACA, полученных методами *in vitro* (с применением субклеточной фракции S9 человеческой печени) и *in vivo* (на лабораторных крысах) для установления основных путей биотрансформации и их различий. Результаты по основным метаболическим преобразованиям, полученные методами *in vitro* и *in vivo* сопоставлены с результатами анализа мочи наркозависимых людей.

Структурную идентификацию метаболитов выполняли методом высокоэффективной жидкостной хроматографии с тандемным масс-спектрометрическим детектированием высокого разрешения.

Результаты. В целом, метаболиты, полученные методом *in vitro* являются продуктами одно- и двух-стадийных трансформаций исходных СК (моногоксилирование, N-деалкилирование и гидролиз), и их предполагаемые структуры в наименьшей степени отличаются от структур исходных СК. В моче и сыворотке крови лабораторных крыс обнаружили дигидродиолы AB-FUBINACA и ADB-FUBINACA, отсутствующие в продуктах ферментации *in vitro*. Однако, концентрация этих метаболитов была невысокой, что затрудняло получение достоверных масс-спектров. Метод *in vivo*, в отличие от *in vitro*, позволял получать только малоинформативные метаболиты, характеризующиеся большей степенью модификации исходной структуры и более глубоким окислением.

Несмотря на то, что набор метаболитов, полученный методом *in vitro*, имеет большее сходство с метаболическим профилем, наблюдаемым для людей, на данный момент целесообразно совместное применение обоих методов, что повышает достоверность заключений о структуре исходного соединения за счет обнаружения большего числа разнородных метаболитов.