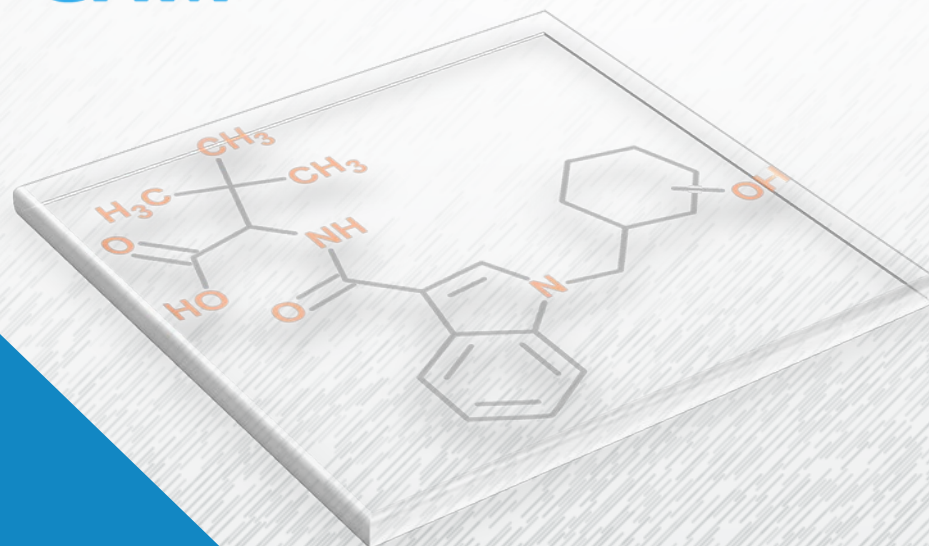
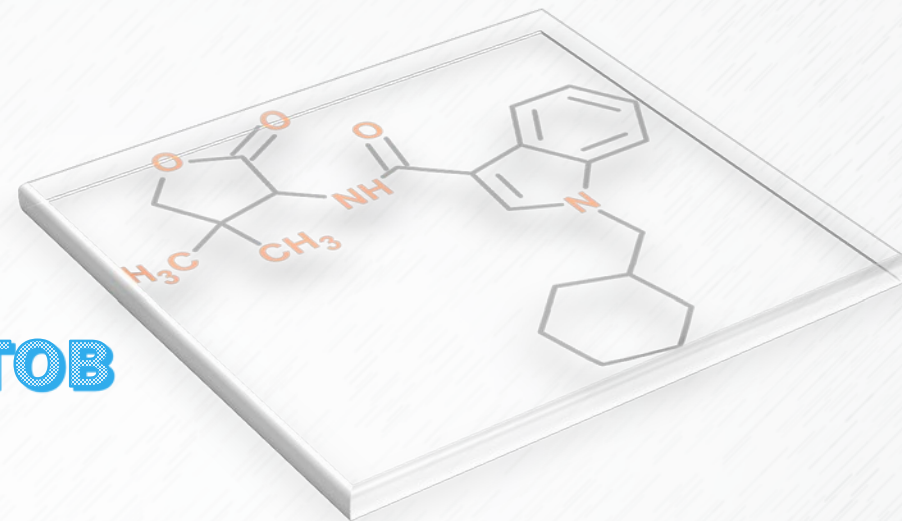


ASTE-2015

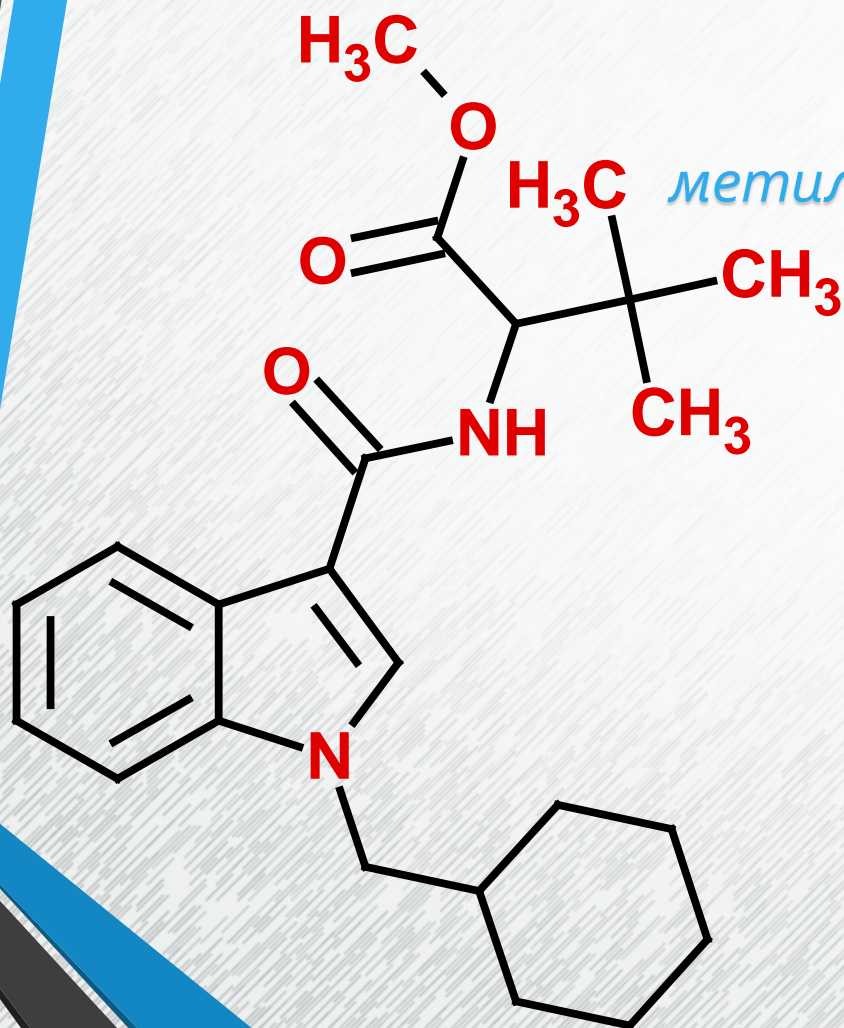
Обнаружение метаболитов нового синтетического каннабимиметика индольной природы MDMB-CHM



А.Л. Печников (Alexlp),
А.Б. Васильев (Nayk),
А.М. Григорьев (Ludens).

MDMB-CHM (MDMB-CHMICA)

Синтетический каннабимиметик
Группа алкилиндов,
метилowych эфиров диметилбутановой кислоты (MDMB)



Метилowy эфир 3,3-диметил-2-(1-циклогексилметил-1H-индол-3-карбоксамидо)бутановой кислоты

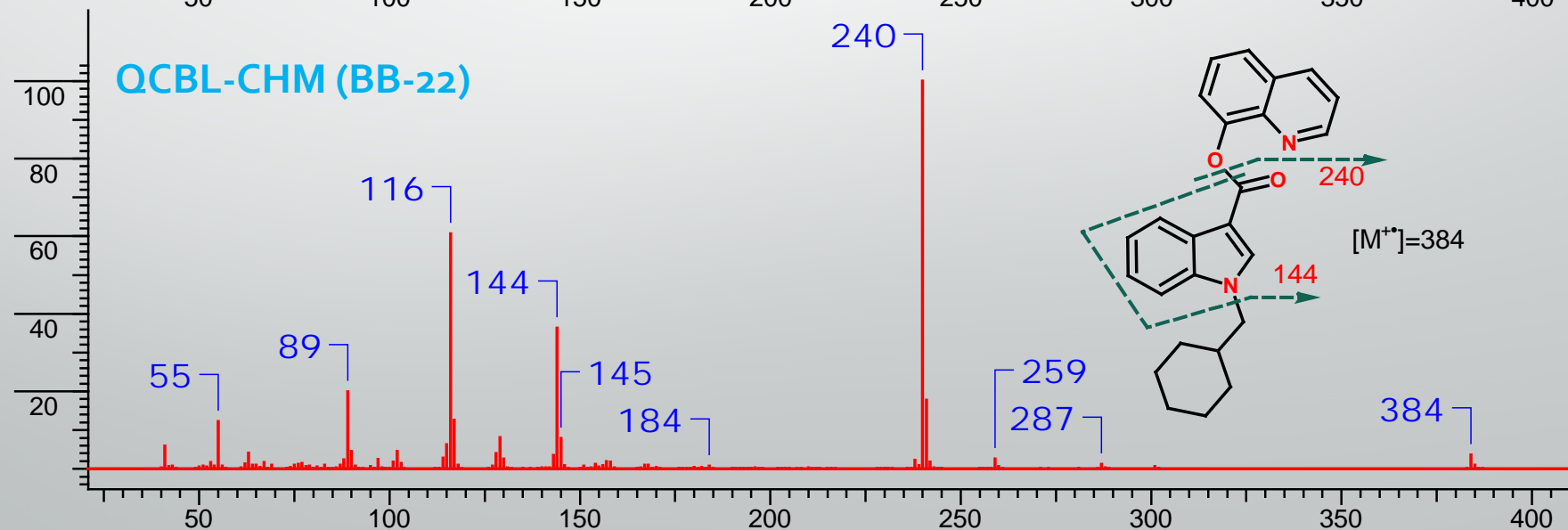
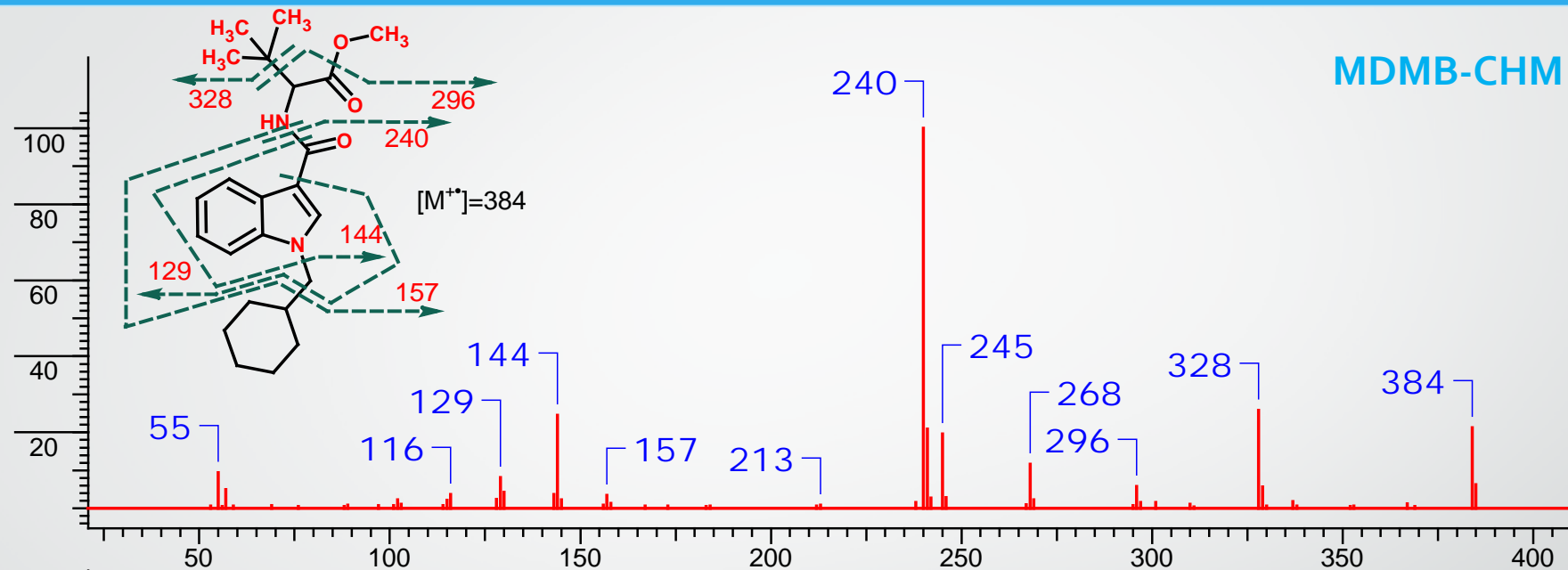
Синонимы: MDMB-CHM
MDMB-CHMICA

Брутто формула: $C_{23}H_{32}N_2O_3$

Молекулярная масса: 384.241293 Da

EKBDRUGS GI:3161 (HP-5MS) FDCS of Russia, Ekaterinburg, Shevyrin V.A., GC/HRMS- and NMR-confirmed

МС, EI, MDMB-CHM vs QCBL-CHM, Возможные ошибки идентификации



ОБОРУДОВАНИЕ И ПРОБОПОДГОТОВКА

GC/MS:

Хроматограф *Agilent 7890A*, колонка HP-5MS, моноквадрупольный масс-спектрометр *Agilent 5975C*, режим электронной ионизации (EI);

HPLC/MS/MS:

Жидкостный хроматограф UltiMate 3000 (Thermo Scientific), колонка Acclaim RSLC 120 C18, масс-спектрометр AmaZon Speed (ионная ловушка, Bruker Daltonics), режим электрораспылительной ионизации (ESI);

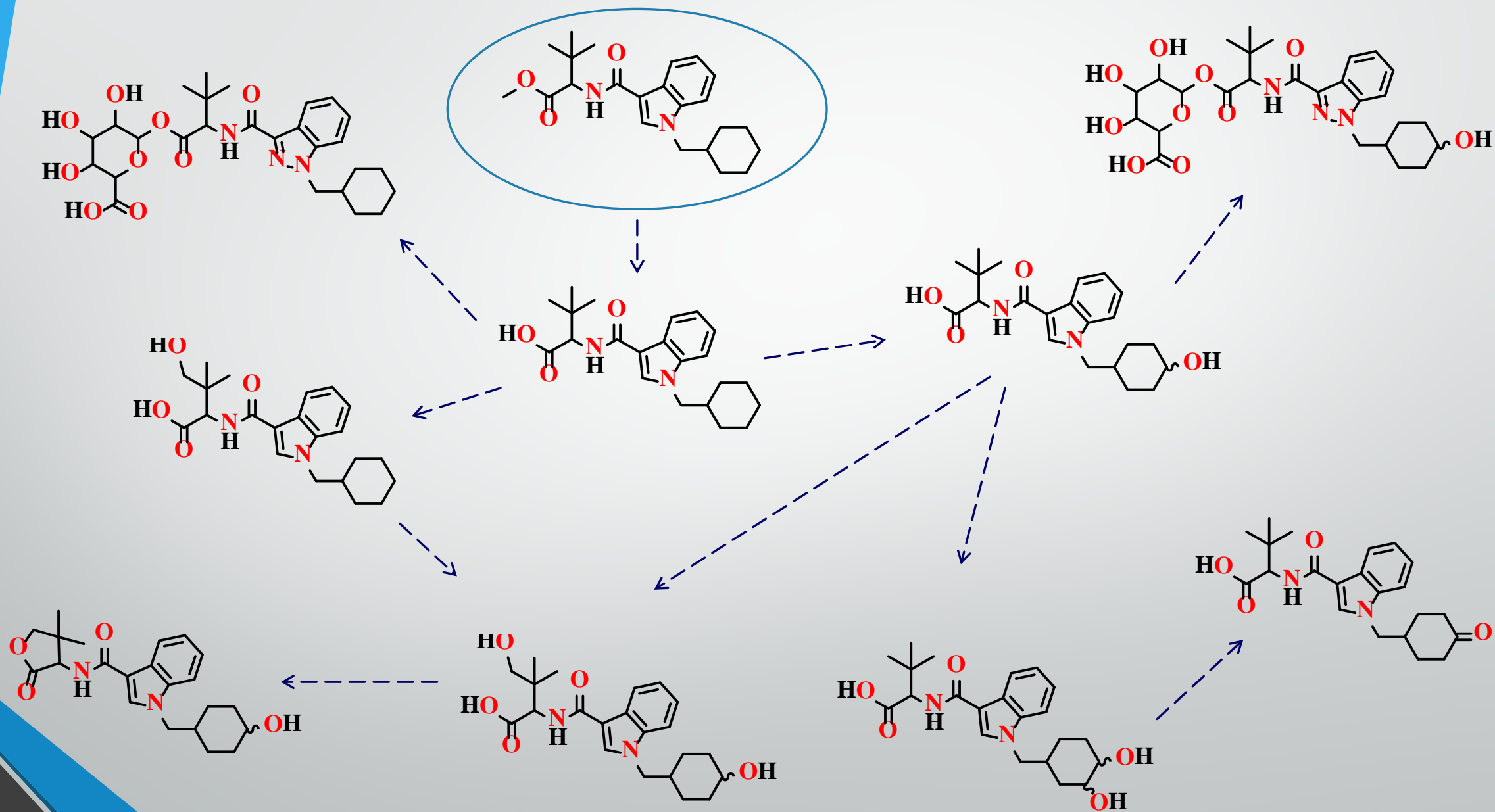
Пробоподготовка:

- ГХ-МС: комбинированный Кислотный (HCl) и Основной гидролиз (NaOH), ЖЖЭ;
- ЖХ-МС\МС: извлечение ацетонитрилом и анализ необработанной мочи;

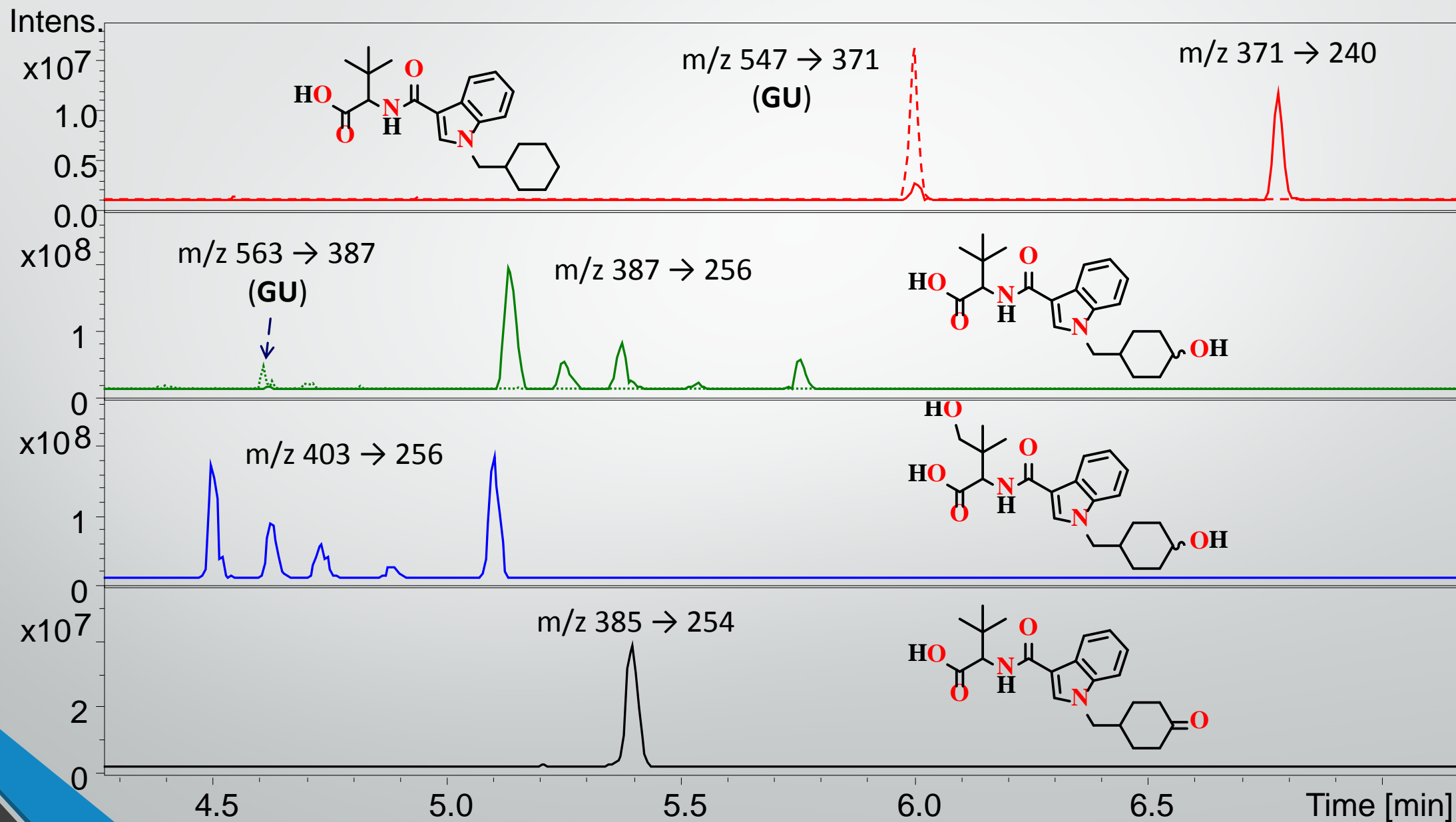
Дериватизация:

CH₃I; BSTFA+1%TMCS

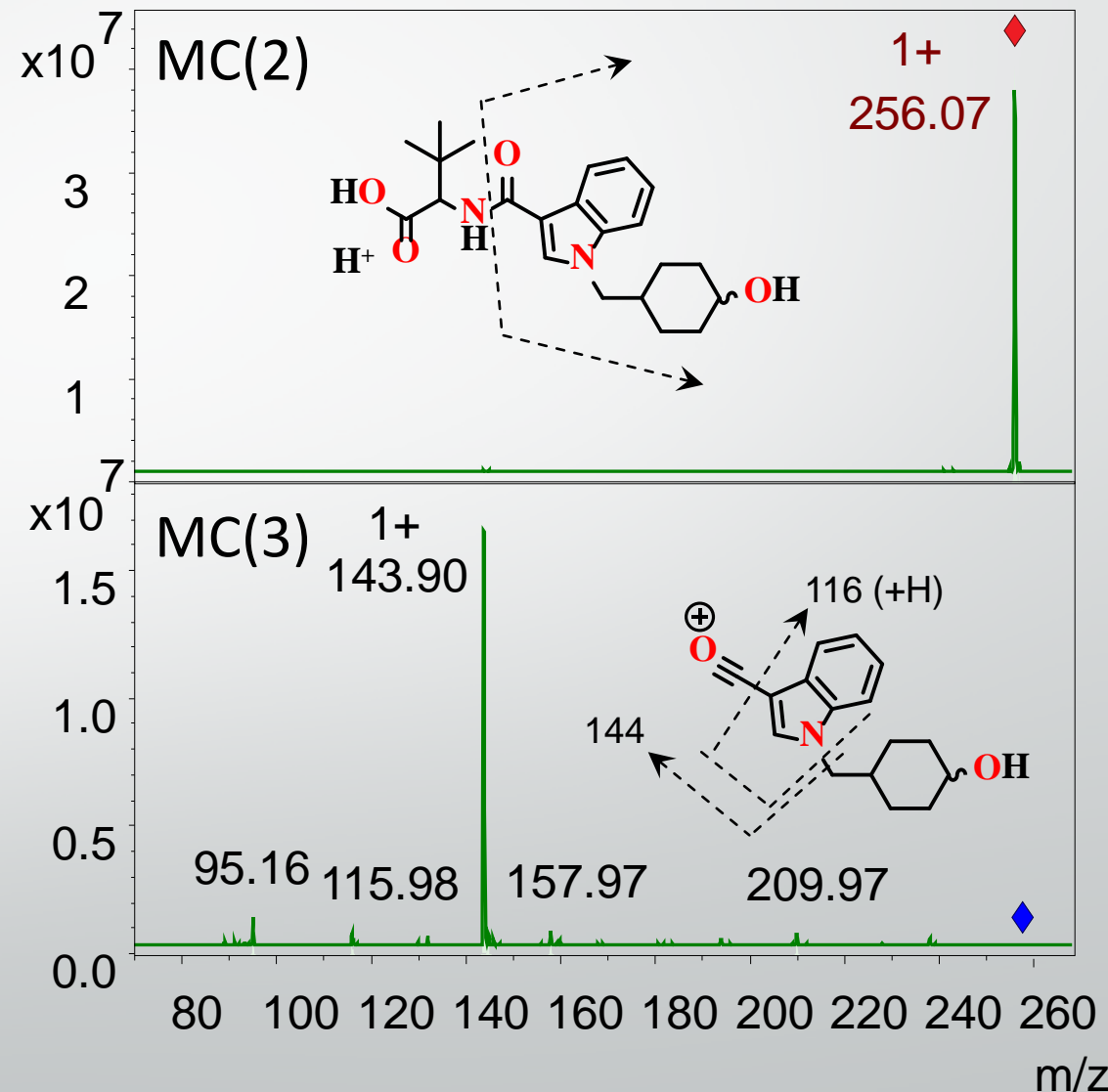
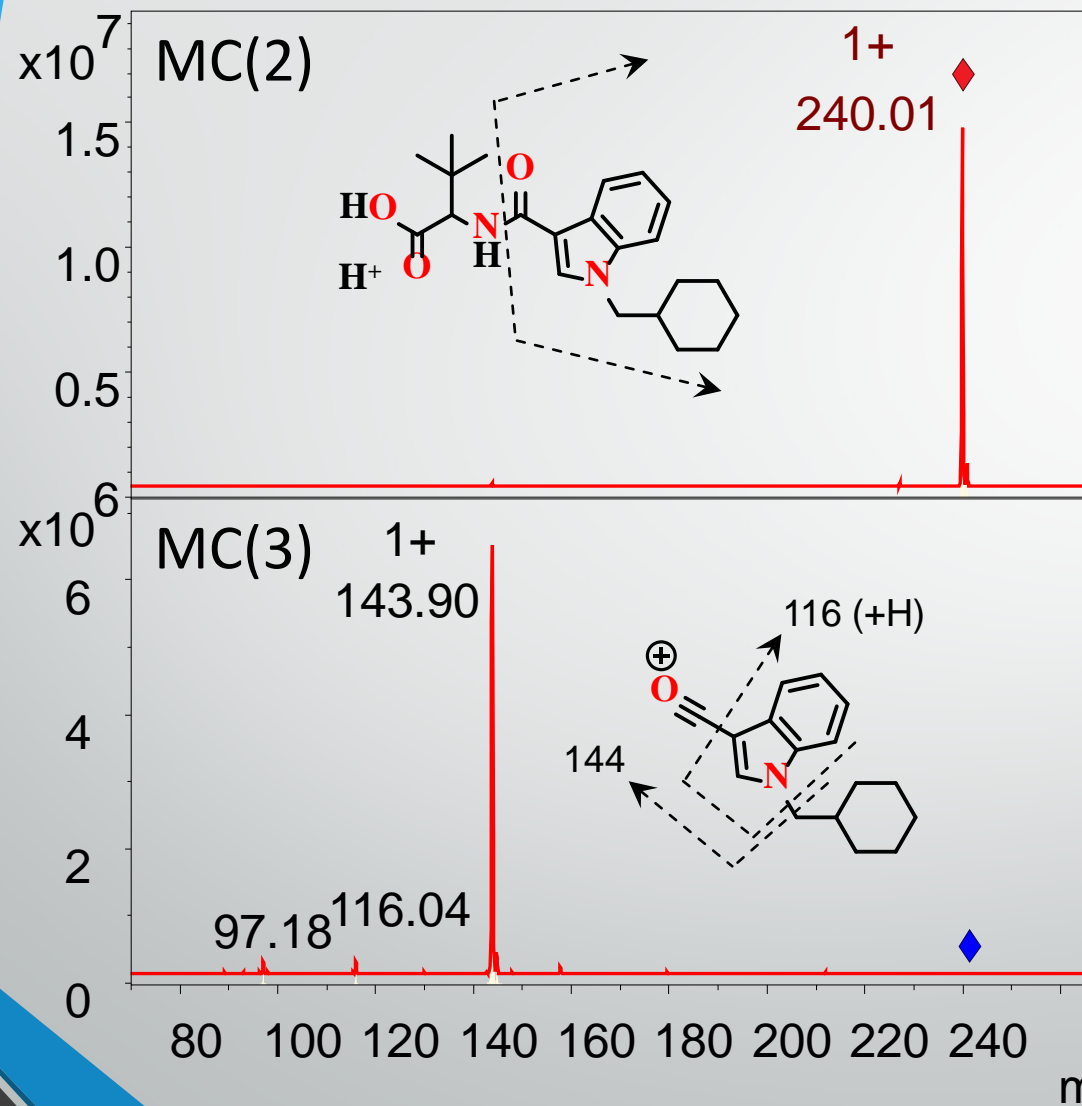
Предполагаемая схема метаболизма



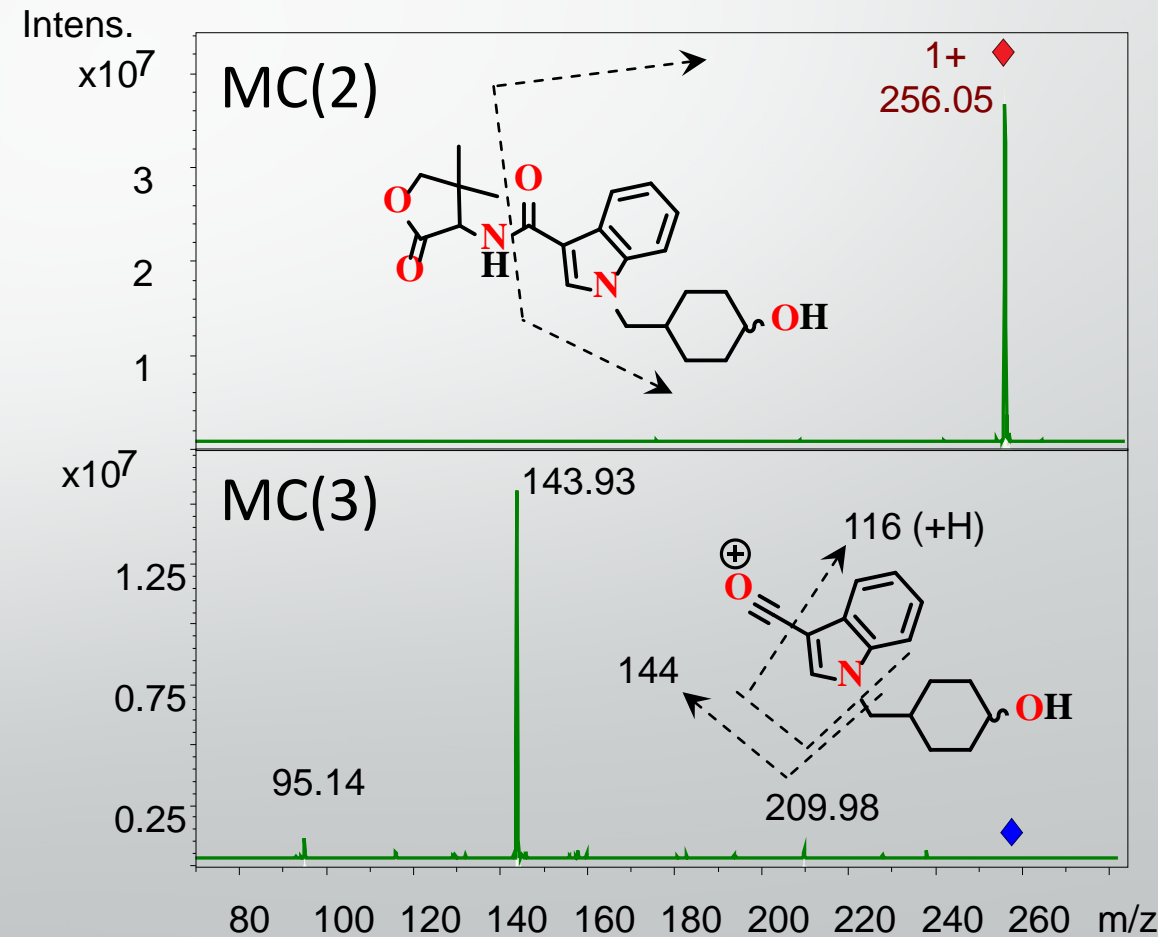
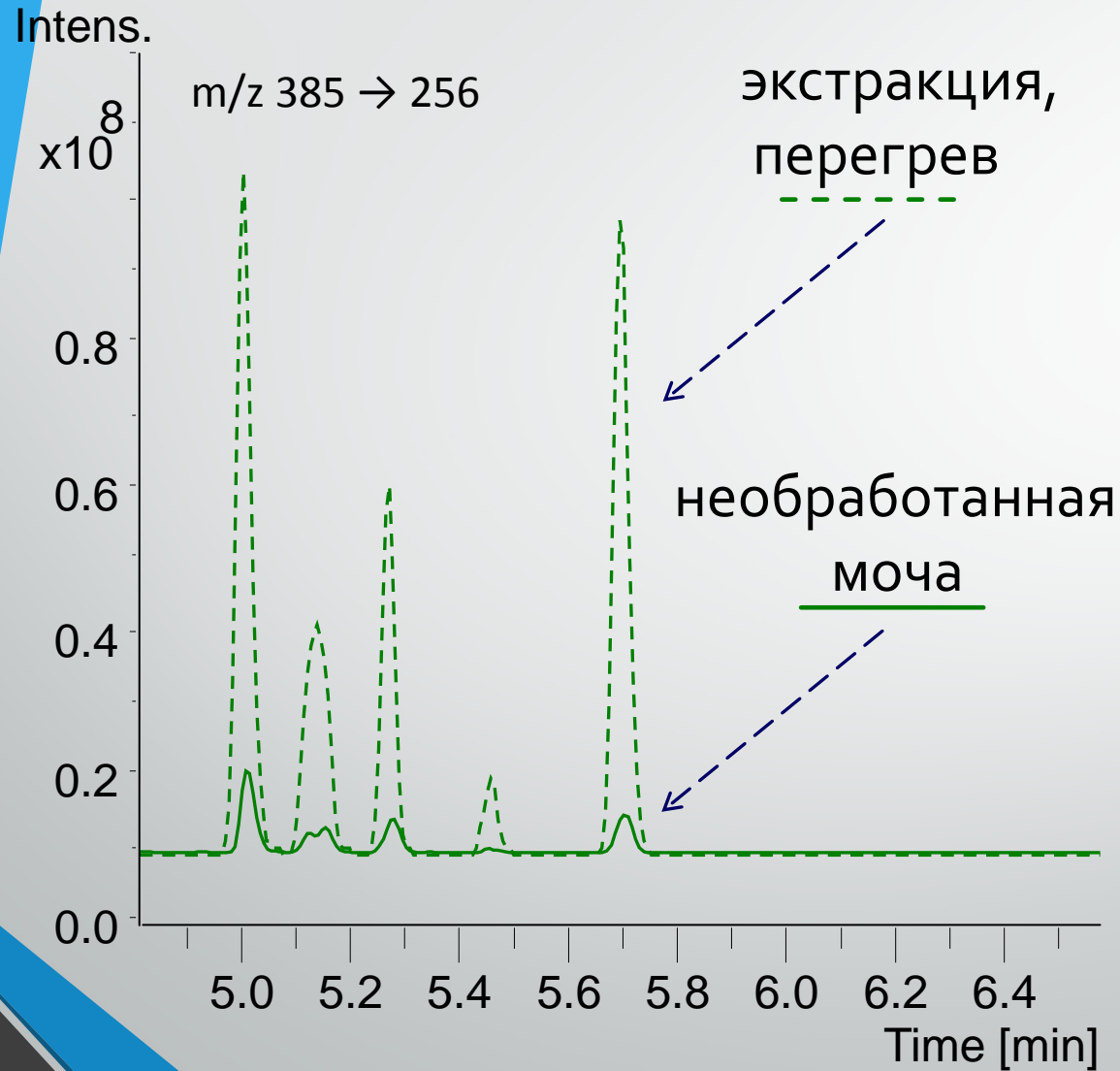
ЖХ, основные метаболиты



MC(n), ESI, основные метаболиты



MC(n), ESI, лактоны

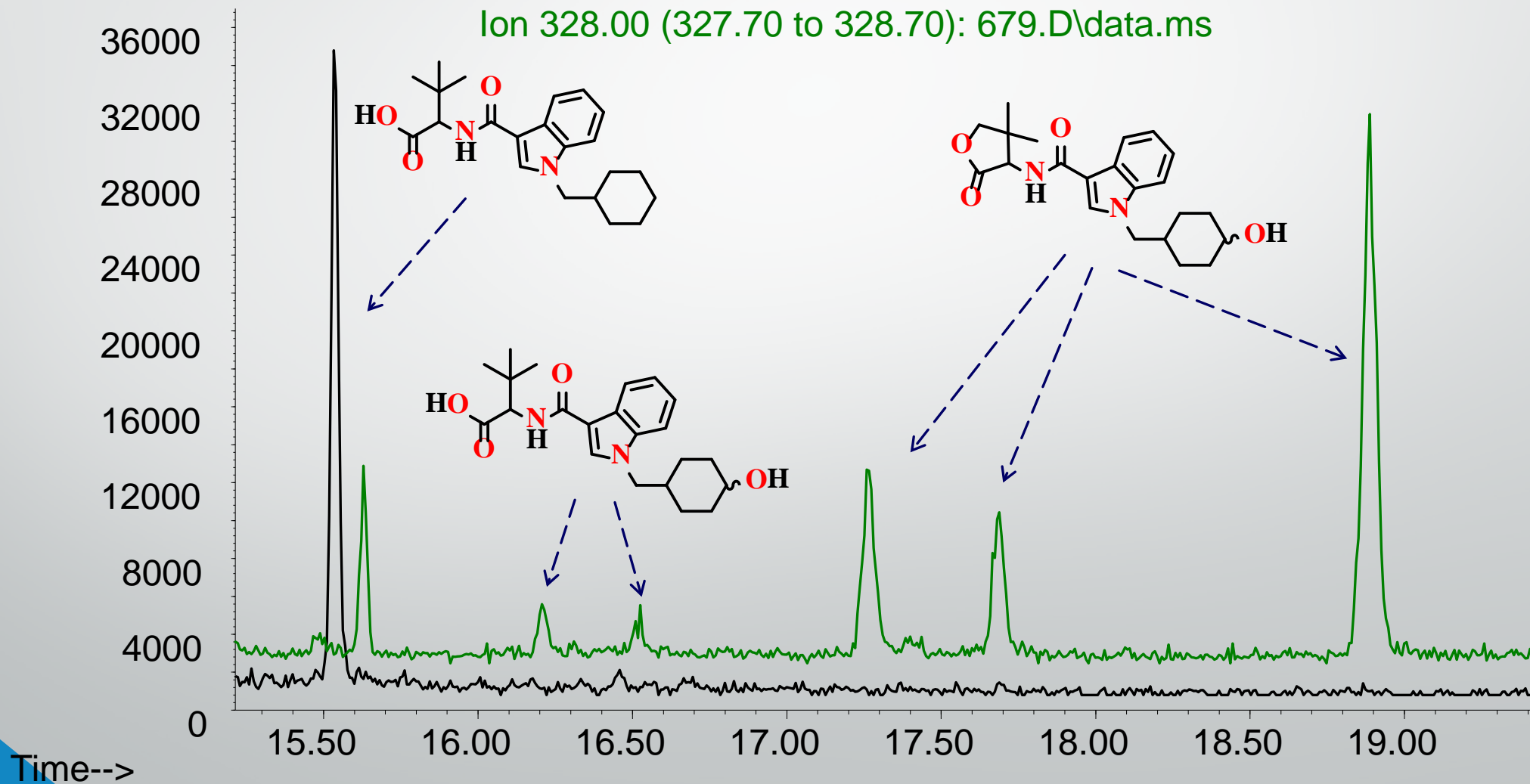


ГХ, гидролиз, ТМС

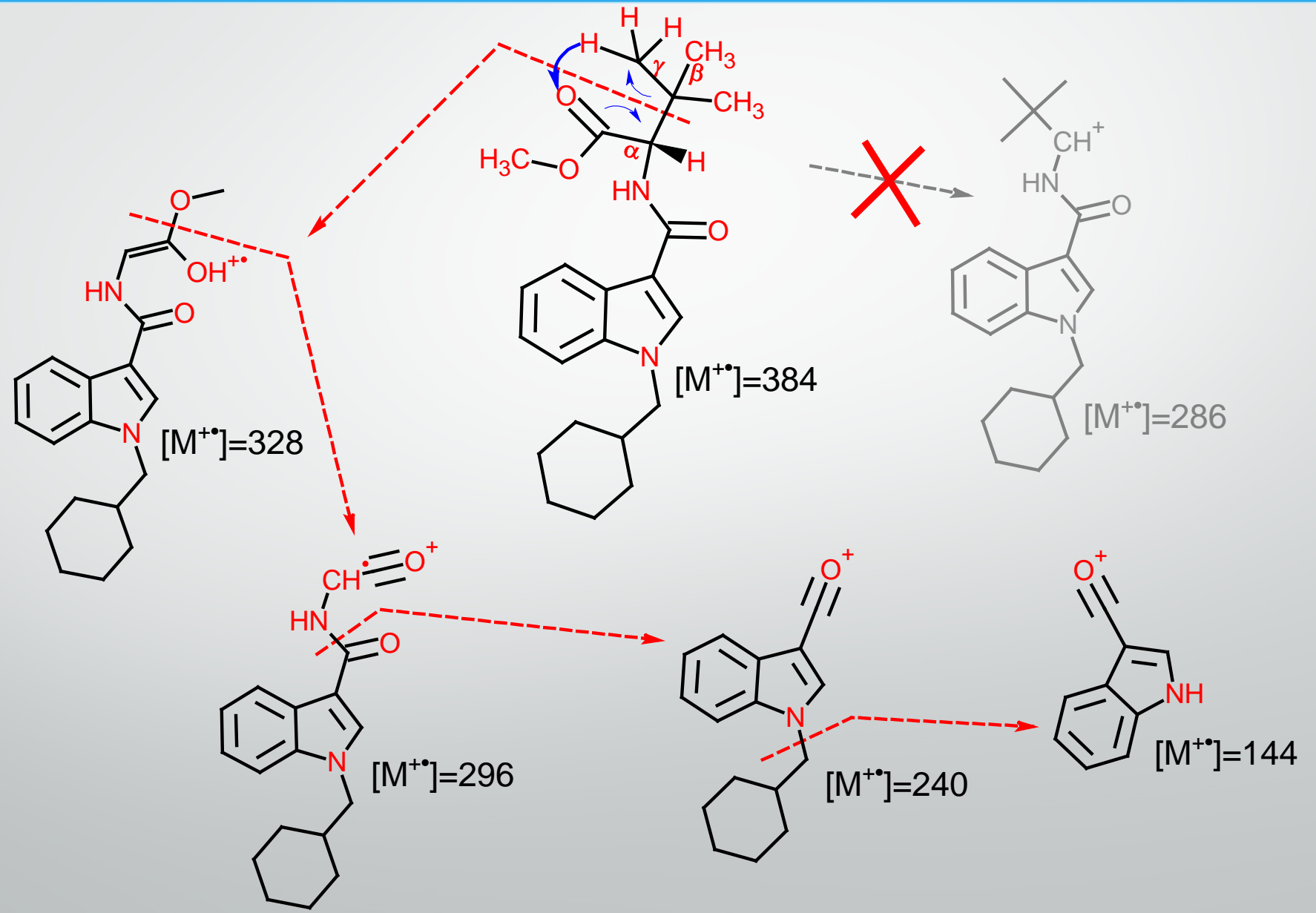
Abundance

Ion 240.00 (239.70 to 240.70): 679.D\data.ms

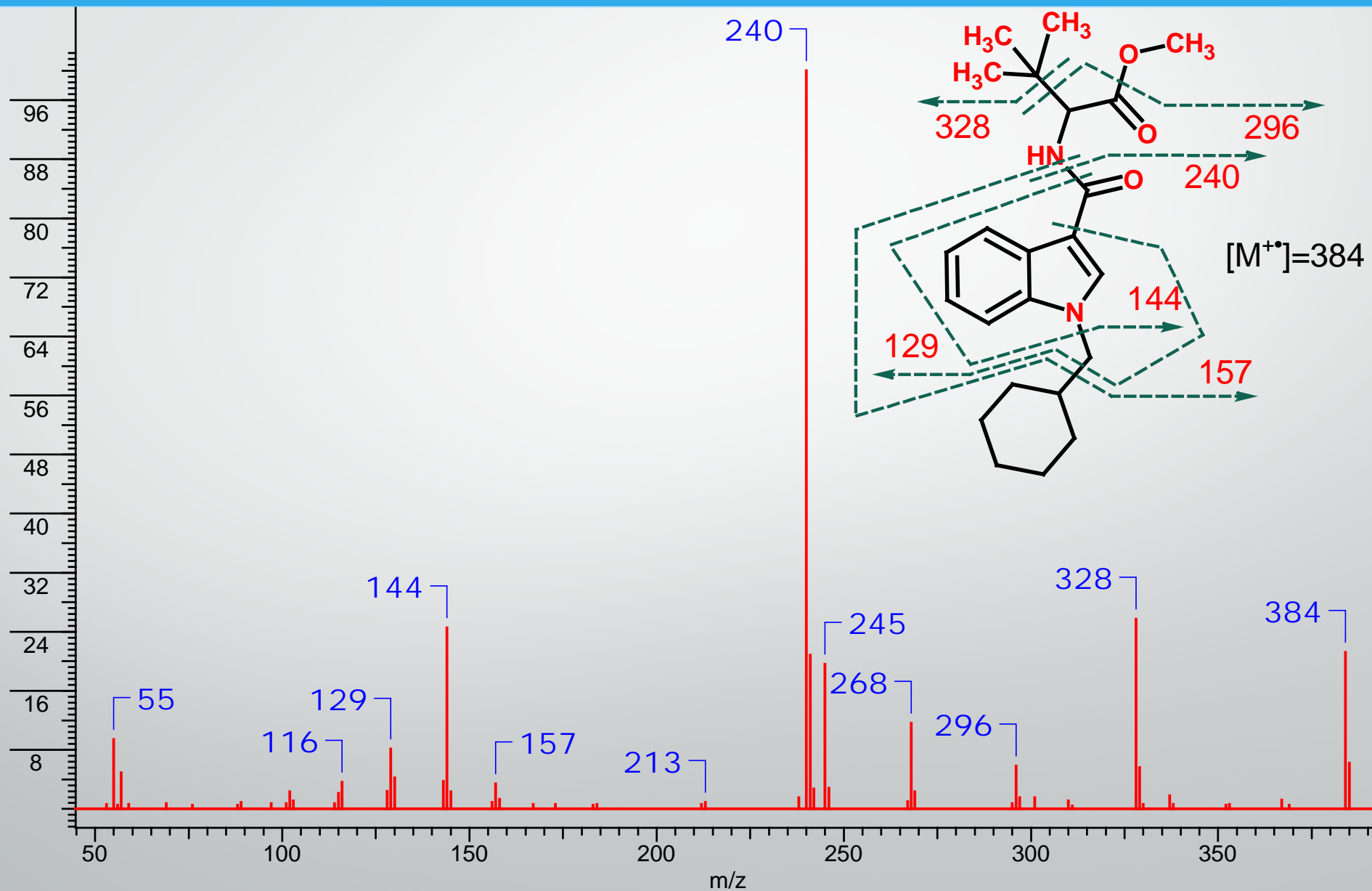
Ion 328.00 (327.70 to 328.70): 679.D\data.ms



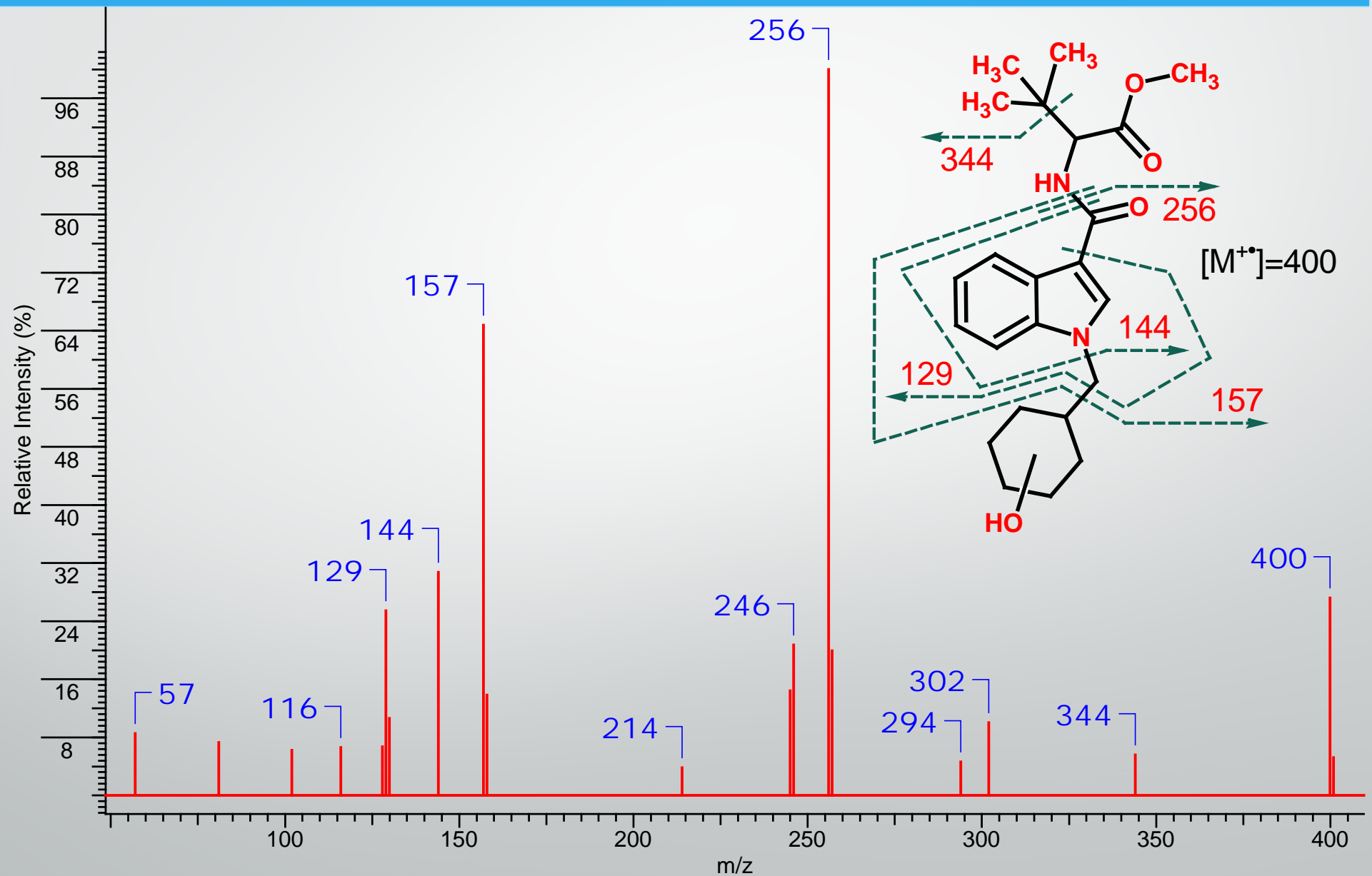
МС, EI, Предполагаемые пути фрагментации. Перегруппировка Мак-Лафферти



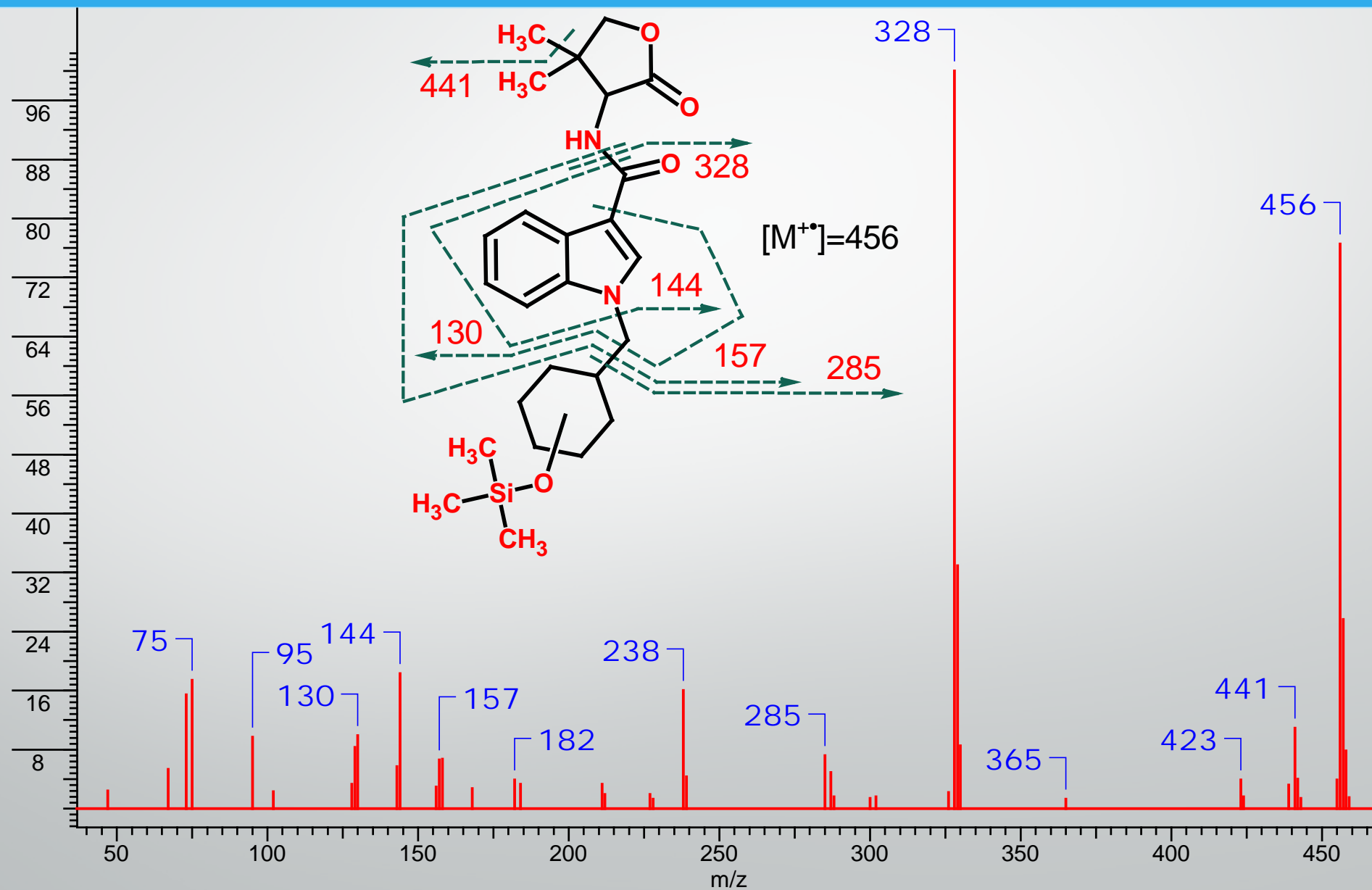
MC, EI, MDMA-CHM-M₁ (COOH), methyl-



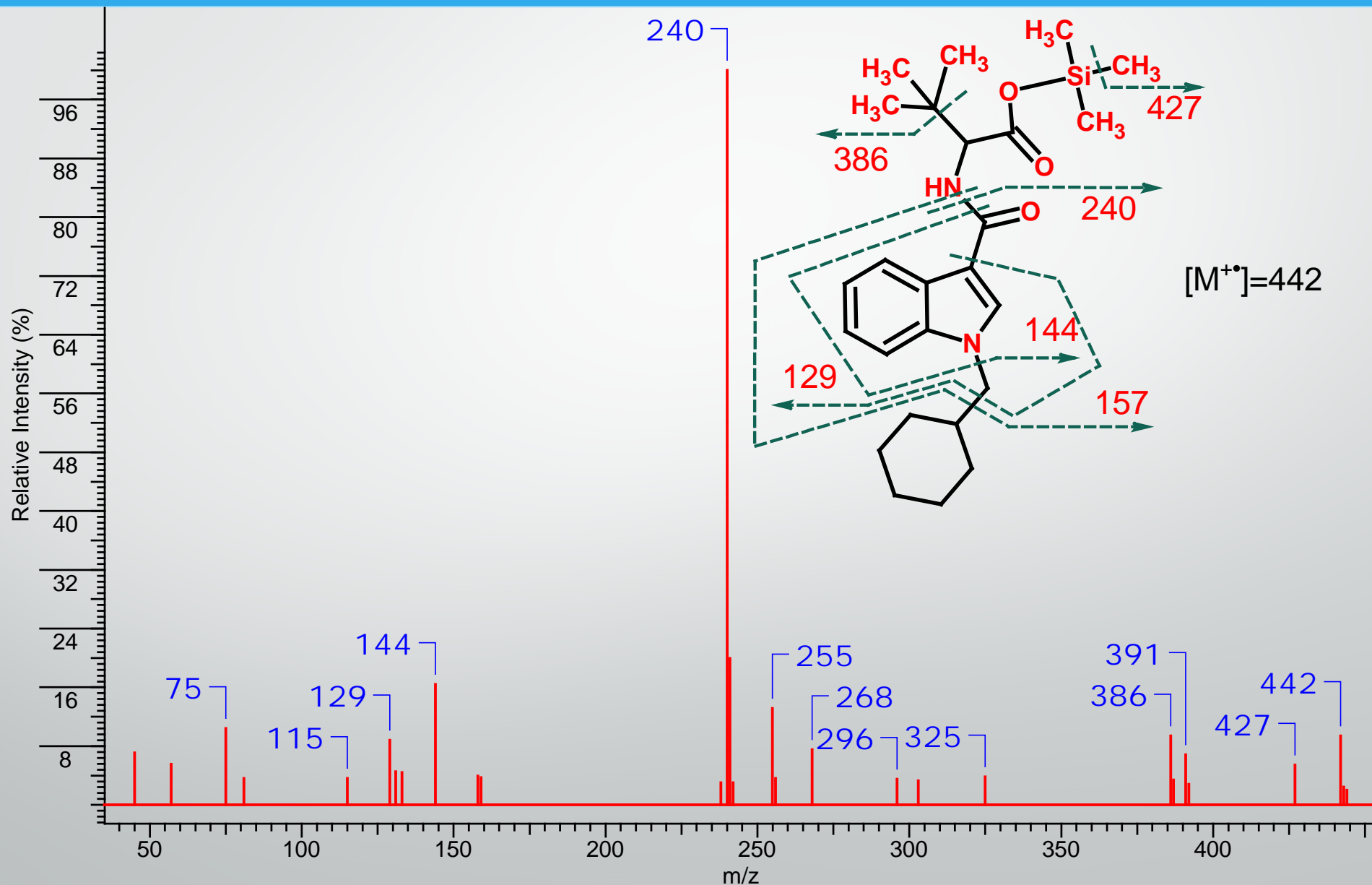
MC, EI, MDMA-M₃ (COOH, HO-), methyl-



MC, EI, MDMA-CHM Marker M₅ (Lactone, HO-), TMS-

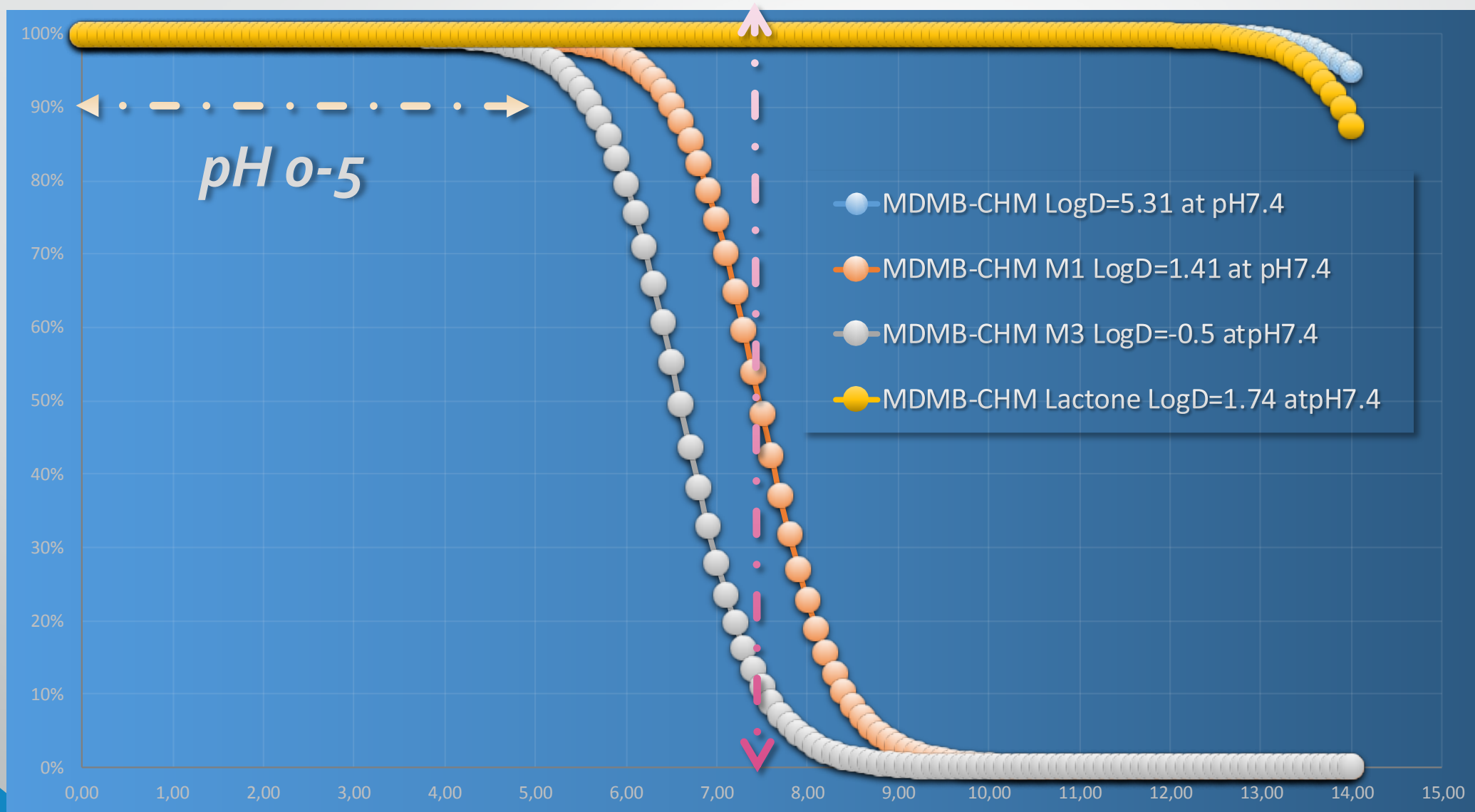


MC, EI, MDMB-CHM-M₁ (COOH), TMS-





Рассчитанные ACD/Labs профили распределения в водных растворах в диапазоне pH 0 – 14





СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!