

МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР НАРКОЛОГИИ

«Утверждаю»

Директор ФБГУ ННЦ Наркологии  
Минздрава России профессор, д.м.н.  
Е.А.Кошкина



«14» августа 2014 г.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ НАРКОТИЧЕСКИХ И ПСИХОАКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ В БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ И ВОЛОСАХ МЕТОДОМ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ С МАСС-СЕЛЕКТИВНЫМ ДЕТЕКТИРОВАНИЕМ

**Информационное письмо**

Москва  
2014 г.

## Аннотация

Разработан метод подтверждающего химико-токсикологического исследования на наличие наркотических и психоактивных веществ в биологических жидкостях (моче,) и волосах человека методом газовой хроматографии с масс-селективным детектированием. Метод предназначен для врачей клинической лабораторной диагностики химико-токсикологических лабораторий наркологических диспансеров.

**Организация разработчик:** ФБГУ ННЦ Наркологии Минздрава России совместно с ЦХТЛ 1-го МГМУ им.И.М.Сеченова.

**Авторы:**, д.х.н. Савчук С.А., д.х.н., профессор Б.Н.Изотов

**Составители и авторы библиотек масс-спектров:** Григорьев А. М.(г.Белгород, СХО), Катаев С. С. (г.Пермь, СХО), Васильев А. Б. (г.Чебоксары, РНД), Мелентьев А. Б. г.(Челябинск, СХО), Лабутин А. В. (г.Томск, КДЛ), Печников А. Л. (г.Салехард, СХО), Шитов Л. Н. (г.Ярославль, ХТЛ), Гофенберг М. А. (г.Екатеринбург, КДЛ), Снятков А. В. (г.Владимир, СХО), Колосова М. В. (г.Красноярск, КДЛ), Скребкова К.А. (г.Курган), Самышкина Н. В. (г.Новый Уренгой, КДЛ), Малышкина А. П. (г.Ноябрьск, КДЛ), Ризванова Л. Н. (г.Нижневартовск, КДЛ), Подоленко Е. В. (г.Сургут, КДЛ), Джурко Ю. А. (г.Ярославль, СХО), Савчук С.А. (Москва, ННЦ Наркологии).

Версия 1.1.1

## Введение

Метод хромато-масс-спектрометрии (ХМС, ГХ/МС) основан на сочетании двух аналитических методов: капиллярной газовой хроматографии и масс-спектрометрии. Метод предназначен для получения объективных данных о наличии наркотических, психоактивных веществ и их метаболитов которые указываются в диагностических заключениях, результатах медицинского освидетельствования, экспертных заключениях, результатах химико-токсикологического контроля и мониторинга.

## Описание метода

Метод хромато-масс-спектрометрии (ХМС, ГХ-МС) основан на сочетании двух аналитических методов: капиллярной газовой хроматографии - метода наиболее селективного по возможности разделения веществ и метода масс-спектрометрии – метода наиболее селективного и чувствительного по детектированию и структурной идентификации компонентов. Наиболее информативные и надежные результаты получают в режиме полного сканирования с регистрацией масс-спектра. Использование режима мониторинга выбранных ионов позволяет повысить чувствительность определения (на порядок величины), но снижает надежность идентификации.

Методика ГХ-МС анализа основана на идентификации определяемых веществ, выделенных из образцов мочи жидкость/жидкостной или твердофазной экстракцией с последующей дериватизацией и хромато-масс-спектрометрическим . Определяемые вещества идентифицируют в автоматическом режиме по двум аналитическим параметрам: времени хроматографического удерживания и масс-спектру. Идентифицированное вещество определяют количественно на основании градуировочной характеристики, которую получают на основании результатов анализа СО.

### Показания и противопоказания к использованию новой метода

#### ПОКАЗАНИЯ:

- диагностика факта употребления наркотических и психоактивных веществ.

ПРОТИВОПОКАЗАНИЯ: отсутствуют.

### Материально-техническое обеспечение метода

Для выполнения методики используют газовые хроматографы Agilent 6890N (США) или Agilent 6850 или Agilent 7820 – Maestro (США-Россия) с автоинжектором Agilent 7683, масс-селективными детекторами Agilent 5973N, 5975 (США), Agilent 5975-Maestro (США-Россия), колонкой (Agilent HP-5MS номер по каталогу 19091S-433) длиной 30м, внутренним диаметром 0.25мм, с толщиной пленки фазы 0.25мкм. Для идентификации веществ используют библиотеки масс-спектров (Приложение 1).

Перечень общелабораторного оборудования и реактивы дан в Приложении 2.

Допускается использовать оборудование, материалы и реактивы с техническими характеристиками аналогичными указанным.

## Описание метода

Метод включает 3 аналитические процедуры подготовки пробы и анализа. При необходимости определения низких концентраций анализируют пробы после кислотного или ферментного гидролиза. При определении метаболитов героина анализируют пробы без гидролиза. Выявление фактов потребления героина выполняют по наличию в пробе 6-моноацетил морфина (6-МAM).

**Процедура 1:** кислотный гидролиз экстракция при pH 9, дериватизация трифторуксусным ангидридом (ТФАА). Определяют индивидуальные вещества следующих химических групп:

- Опиаты, метаболиты, сопутствующие компоненты
- Амфетамины и их метаболиты
- Барбитураты и их метаболиты
- Бензодиазепины и продукты их гидролиза
- Синтетические наркотические вещества и их метаболиты
- Стимуляторы синтетического происхождения и их метаболиты

**Процедура 2:** щелочной гидролиз экстракция при pH 3, дериватизация пентафторпропионовым ангидридом с пентафторпропанолом (ПФПА и ПФПОН) Определяемое вещество детектируют в виде пентафторпроизводного (ПФП): 11- нор –дельта- 9-карбокситетрагидроканнабиноловая кислота

- ПФП производные веществ, определяемых по процедуре 1

**Процедура 3:** кислотный гидролиз экстракция при pH 9, дериватизация BSTFA. Определяют индивидуальные вещества следующих химических групп в виде триметилсилильных производных (TMS)

- Псилоцин, псилоцибин TMS
- Бензоилэкгонин TMS
- Метаболиты JWH-018, 073, 250 TMS
- TMS производные веществ, определяемых по процедуре 1.

Процедуры 1 и 2 выполняют на одном приборе. Для процедуры 3 используют отдельный прибор.

### Определение в моче веществ неполярной и слабополярной природы по процедуре 1

По процедуре 1 определяются вещества входящие в состав наркотических средств, психотропных и сильнодействующих веществ с неполярными и м слаболярными свойствами (см. приложении 3). Для выявления веществ данной группы выполняются следующие процедуры.

**Приготовление стандартных растворов.** Стандартные растворы готовят из чистых (не менее 99% основного вещества) химических веществ. Можно использовать готовые стандартные образцы состава в виде растворов в метаноле или приготовленные на биологической матрице (моче).

**Приготовление раствора внутреннего стандарта дифениламина.**

**Приготовление раствора «А».** В мерную пробирку вместимостью 10 мл вносят 10 мг дифениламина (ДФА), добавляют 10 мл метанола до метки. Концентрация ДФА в растворе «А» составляет 1 мг/мл.

**Приготовление раствора «Б».** В мерный цилиндр вместимостью 100 мл автоматическим дозатором вносят 2 мл раствора А и добавляют метанол до метки 100 мл. Концентрация ДФА в растворе «Б» составляет 20 мкг/мл.

**Приготовление градуировочных растворов из чистых веществ.** Для приготовления стандартных растворов используют вещества чистотой 99%.

Ниже дан пример приготовления стандартных растворов на примере морфина.

**Приготовление раствора исходного стандартного раствора морфина 1000 мкг/мл.** В мерную пробирку с притертой пробкой вместимостью 10 мл вносят 10 мг морфина (в виде основания) и добавляют метанол до метки 10 мл. Концентрация морфина (в виде основания) в исходном стандартный растворе составляет 1000 мкг/мл. Из исходного стандартного раствора готовят базовые и калибровочные растворы.

**Базовый стандартный раствор «А» морфина (10 мкг/мл) в метаноле.** К 5 мл метанола добавить автоматическим дозатором 50 мкл исходного раствора морфина (1000 мкг/мл). Предварительно от 5 мл метанола отобрать и отбросить 50 мкл метанола.

**Базовый стандартный раствор «Б» морфина (0,1 мкг/мл).** Раствор К 10 мл метанола добавить 100 мкл раствора «А» (10 мкг/мл). Предварительно от 10 мл метанола отобрать и отбросить 100 мкл метанола.

**Приготовление калибровочных растворов морфина на биологической матрице (моче).** Калибровочные растворы морфина 6, 15, 50, 100, 150 нг/мл готовят последовательным разбавлением из базового стандартного раствора «Б».

**Калибровочный раствор морфина концентрацией 6 нг/мл.** Внести 9.4 мл мочи в 10-мл стеклянную мерную колбу, добавить 600 мкл базового стандартного раствора морфина «Б» (0,1 мкг/мл).

**Калибровочный раствор морфина концентрацией 15 нг/мл.** Внести 8.5 мл мочи в 10-мл стеклянную мерную колбу, добавить 1500 мкл базового стандартного раствора «Б» (0,1 мкг/мл), довести объем до метки (10 мл) мочой.

**Калибровочный раствор морфина концентрацией 50 нг/мл.** Внести 10 мл мочи в 10-мл стеклянную мерную колбу. Отобрать и отбросить автоматическим дозатором 50 мкл мочи, добавить 50 мкл базового стандартного раствора «А» (10 мкг/мл).

**Калибровочный раствор морфина концентрацией 100 нг/мл.** Внести 10 мл мочи в 10-мл стеклянную мерную колбу. Отобрать и отбросить автоматическим дозатором 100 мкл мочи, добавить 100 мкл базового стандартного раствора «А» (10 мкг/мл).

**Калибровочный раствор морфина концентрацией 150 нг/мл.** Внести 10 мл мочи в 10-мл стеклянную мерную колбу. Отобрать и отбросить автоматическим дозатором 150 мкл мочи, добавить 150 мкл базового стандартного раствора «А» (10 мкг/мл).

**Приготовление смеси органических растворителей.** Для экстракции готовят

смесь растворителей:

1. изопропиловый спирт 10%
2. дихлорметан 35%
3. 1,2-дихлорэтан 23%
4. гептан 32%

В мерный цилиндр на 100 мл вносят 10 мл изопропилового спирта, 35 мл дихлорметана, 23 мл 1,2-дихлорэтана и 32 мл гептана. Смесь перемешивают и хранят в герметично закрытой стеклянной емкости.

Можно использовать смесь метиленхлорид : гептан : изопропанол = 7:2:1

**Приготовление твердого буфера.** Взвешивают 100 г гидрокарбоната натрия и 50 г карбоната натрия, перемешивают и перетирают в ступке.

**Подготовка пробы для анализа.** Методика подготовки пробы включает стадии гидролиза, экстракции и дериватизации.

**Кислотный гидролиз.** В пробирку с завинчивающейся крышкой вместимостью 9 мл вносят 3 мл анализируемой мочи, добавляют 300 мкл концентрированной HCl, и выдерживают 1 час при 90°C. Гидролизат охлаждают до комнатной температуры. К гидролизату добавляют 300 мкл аммиака 10% - ного водного и экстрагируют, как описано ниже.

**Выделение веществ, определяемых по процедуре 1, жидкость/жидкостной экстракцией.** В чистую, сухую пробирку объемом 10 мл внести 3 г хлорида натрия, твердый буфер на кончике шпателя 40-50 мг и 3 мл экстракционной смеси.

- В пробирку вносят 3 мл мочи или гидролизата мочи.
- Добавляют 30 мкл внутреннего стандарта дифениламина (раствор «Б» концентрацией 20 мкг/мл), концентрация ВС в пробе 200 нг/мл.
- Экстрагируют 10 мин на орбитальном шейкере
- Центрифугируют при 3000 об/мин 5 мин.
- Отделяют органический слой, переносят его в пробирку объемом 4 мл или в металлический колпачок TOX-LAB для упаривания и упаривают в токе горячего воздуха (экстракт не пересушивать, прекращать упаривание сразу после исчезновения жидкой фазы). К упаренному экстракту добавляют 70 мкл трифторуксусного ангидрида, укупоривают крышкой с тефлонированной мембраной, встряхивают реакционную смесь на вибромиксере 2-3 сек, выдерживают 30 мин при 55°C, после чего удаляют остаток дериватирующего агента упариванием в токе горячего воздуха. К сухому остатку добавляют 70 мкл этилацетата, встряхивают на вибромиксере 2-3 сек, 1 мкл пробы вводят в хроматограф.

**Хромато-масс-спектрометрический анализ.** Хроматограф и масс-спектрометрический детектор включают и настраивают в соответствии с инструкцией по эксплуатации и устанавливают параметры хроматографирования и масс-спектрометрического детектирования. Градуировку приборов для проведения количественного анализа и выполняют по методу внутреннего стандарта согласно инструкции к прибору.

Хроматографический шприц перед анализом и после анализа промывают двумя растворителями (толуолом и ацетоном), по 5 раз каждым растворителем.

**Условия ГХ-МС анализа. Метод 1 “SCREEN”.** Температурная программа термостата колонок: начальная температура 100°C с изотермической выдержкой в течение 1 мин, с последующим температурным градиентом 35°C/мин до 300°C с изотермической выдержкой 15 мин. Анализ в режиме постоянного давления газа-носителя (Constant Pressure). В качестве газа носителя используют гелий марки «А». Температура испарителя хроматографа составляет 270°C, аналитического интерфейса (хроматограф/масс-спектрометр) 280°C. Пробу вводят в режиме с делением потока (split) 1/10.

Времена удерживания определяемых соединений (см. приложение 4) получают по методу фиксации времен удерживания (Retention Time Locking, RTL). Настройку метода RTL осуществляют по дифениламину, меняя давление в узле ввода таким образом, чтобы время удерживания дифениламина в выбранных условиях хроматографирования составило 5.50±0.03 мин.

**Метод 2 “DOAS”.** Температурная программа термостата колонок: начальная температура 50°C с изотермической выдержкой в течение 0.5 мин, с последующим температурным градиентом 99°C/мин до 100°C с изотермической выдержкой 1 мин, с последующим температурным градиентом 15°C/мин до 280°C с изотермической выдержкой 30 мин. Анализ в режиме постоянного давления газа-носителя (Constant Pressure). В качестве газа носителя используют гелий марки «А». Температура испарителя хроматографа составляет 270°C, аналитического интерфейса (хроматограф/масс-спектрометр) 280°C. Пробу вводят в режиме с делением потока (split) 1/10. Настройку метода RTL осуществляют по дифениламину, меняя давление в узле ввода таким образом, чтобы время удерживания дифениламина в выбранных условиях хроматографирования составило 9.26±0.03 мин.

**Условия масс-спектрометрического детектирования.** Для многокомпонентной идентификации веществ по процедуре 1 используют режим сканирования по полному ионному току (SCAN), при количественном анализе также используют режим сканирования по полному ионному току, а в случае необходимости определения с пределом обнаружения ниже 50 нг/мл используют режим мониторинга по выбранным ионам (SIM).

**Анализ в режиме сканирования по полному ионному току.** “Задержка на растворитель” время включения катодов и анализатора после прохождения по колонке фронта растворителя - через 3 мин после ввода пробы.

- Температура источника ионов 230°C
- Температура анализатора 150°C
- Диапазон масс m/z 41-650 а.е.м.
- Напряжение на умножителе: результат, полученный при автоматической настройке по перфторбутиламину в режиме ATUNE.

**Анализ в режиме мониторинга по выбранным ионам (SIM).** Детектирование в режиме SIM выполняют в случаях, когда концентрация определяемых веществ ниже 25-50 нг/мл, при этом идентификационная значимость полученных результатов будет существенно ниже, поскольку

полный спектр не фиксируется. В качестве характеристичных ионов могут быть выбраны: базовый ион масс-спектра, молекулярный ион определяемого соединения или фрагментный ион наибольшей интенсивности. Выбранные ионы должны быть специфичны для определяемого соединения и не содержаться в фоне. Наиболее специфичный (целевой, target) ион используют для количественного определения, два других иона используют для подтверждения правильности идентификации.

### **Последовательность выполнения измерений, контроль ложноположительных и ложноотрицательных результатов**

Последовательность выполнения измерений по процедурам 1, 2, 3 на хроматографе с масс-селективным детектором при анализе экстрактов биологических проб (мочи):

1. **Контроль фона прибора.** Перед началом работы анализ растворителя (этилацетата) по методу SCREEN для контроля фона прибора по определяемым веществам.
2. **Положительный контроль.** Анализ контрольной мочи (QC) содержащей известные введенные содержания определяемых веществ на уровне 100 нг/мл по методу DOAS.
3. **Отрицательный контроль.** Анализ контрольной мочи (BLANK) не содержащей определяемых веществ по методу DOAS.
4. **Контроль фона прибора между пробами.** Между пробами выполняют анализ растворителя (этилацетата) по методу SCREEN для контроля фона прибора по определяемым веществам.
5. **Последовательность применения библиотек** масс-спектров для обработки результатов дана в табл 1 . Для автоматической идентификации в первую очередь применяют AMDIS библиотеки, имеющие времена удерживания определяемых соединений. При отрицательном результате идентификации используют более подробные AMDIS библиотеки не содержащие времен удерживания. В этом случае при положительном результате идентификации необходимо подтвердить правильность идентификации анализом стандартного образца. При использовании библиотек в PBM формате для «ручной» идентификации правильность идентификации подтверждают анализом стандартного образца.

При отсутствии стандартных образцов состава для положительного контроля могут быть использованы пробы мочи положительные по определяемым веществам. Уровень концентраций в этих пробах оценивают относительно внутреннего стандарта – дифениламина.

### **Возможные осложнения и способы их устранения**

Способы оценки состояния прибора, основные факторы, влияющие на образование ложноположительных и ложноотрицательных результатов и



приемы устранения наиболее распространенных проблем даны в таблице 1.

Таблица 1. Оценка состояния хромато-масс-спектрометра и выявление наиболее распространенных неисправностей и проблем.

Проверка параметров	Метод контроля	Типичные проблемы при отрицательном результате проверки	Способ устранения
Проверка параметров масс-спектрометрического детектора	Стандартная процедура настройки детектора (atune MSD)	Загрязнение источника ионов, неисправность детектора	Чистка источника ионов
Проверка параметров масс-спектрометрической системы (хроматографа и детектора)	Анализ стандартной смеси	Потеря эффективности хроматографической колонки, неисправность хроматографа	Подрезка начального участка колонки или замена колонки

Таблица 2. Факторы, влияющие на образование ложноположительных и ложноотрицательных результатов.

Факторы	Проблема	Причина	Метод контроля	Способ устранения
<b>Ложноотрицательные результаты Погрешности Экстракции</b>	Снижение выхода экстракции после кислотного гидролиза	pH пробы вне диапазона,	Анализ положительных контрольных проб мочи (QC). Интенсивность пика ВС не менее 70000 ед.	Заменить реактивы, посуду, повторить экстракцию
Погрешности упаривания	Потери амфетаминов и веществ, близких им по летучести	Слишком высокая температура и длительность упаривания (пересушивание экстракта)	То же	Снизить длительность упаривания. Температура упаривания не выше 75 <sup>0</sup> С, прекращать упаривание сразу после

				исчезновения жидкой фракции
Погрешности дериватизации	Неполная дериватизация	Наличие влаги в экстракте	то же, полноту дериватизации оценивают по внутреннему стандарту (не менее 75%)	Высушить экстракт, заменить дериватирующий агент
<b>Ложноположительные результаты</b>  Наличие определяемых веществ в пробе BLANK	Химическая память шприца	Загрязнения остатками предыдущих проб	Анализ отрицательных контрольных проб мочи (BLANK). Интенсивность пика ВС не менее 70000 ед.	Промыть или заменить шприц
Наличие определяемых веществ в пробе BLANK	Химическая память узла ввода прибора	Загрязнения остатками предыдущих проб	То же	Заменить лайнер и полимерную мембрану в узле ввода (септу)
Наличие определяемых веществ в пробе BLANK	Загрязнения химической посуды	Некачественная мойка посуды	То же	Вымыть посуду водой с ПАВ, крышки промыть этанолом
Наличие определяемых веществ в пробе BLANK	Загрязнения реактивов и растворителей	Попадание следов определяемых веществ в реактивы	То же	Заменить реактивы и растворители

### **Эффективность использования медицинской технологии**

Согласно сложившейся мировой практике методы хромато-масс-спектрометрии являются наиболее селективными и специфичными при подтверждающем ис-

следовании биологических объектов на наличие наркотических, сильнодействующих и психоактивных веществ. Однако, существуют методические проблемы мешающие надежному определению и приводящие к появлению ложнонотрицательных результатов. Описание проблем и пути их решения даны ниже.

Проблема 1. При использовании программы AMDIS основными источниками ошибок идентификации являются плохая форма хроматографического пика и наличие высоких концентраций фоновых веществ, коэлюирующихся с целевыми компонентами. Для устранения этих мешающих влияний анализ выполняли по 4-м хроматографическим методам. Для этого нативные и дериватизированные экстракты в виде ТМС или ТФА производных анализировали по двум хроматографическим программам SCREEN и DOAS в режимах с делением и без деления потока (всего 4 процедуры) [3]. Главной задачей анализа по нескольким процедурам – получить определяемое соединение в том месте хроматограммы, которое свободно от фоновых соэкстрактивных компонентов. Поскольку в реальных может варьироваться состав эндогенных и целевых компонентов параметры меняют последовательно. Для этого аликвоты пробы с гидролизом, без гидролиза, Из них готовят нативные и дериватизованные ТФА и ТМС экстракты, которые затем анализируют по 4 –м хроматографическим методам. Полную схему используют при анализе на неизвестное вещество или при контрольном анализе.

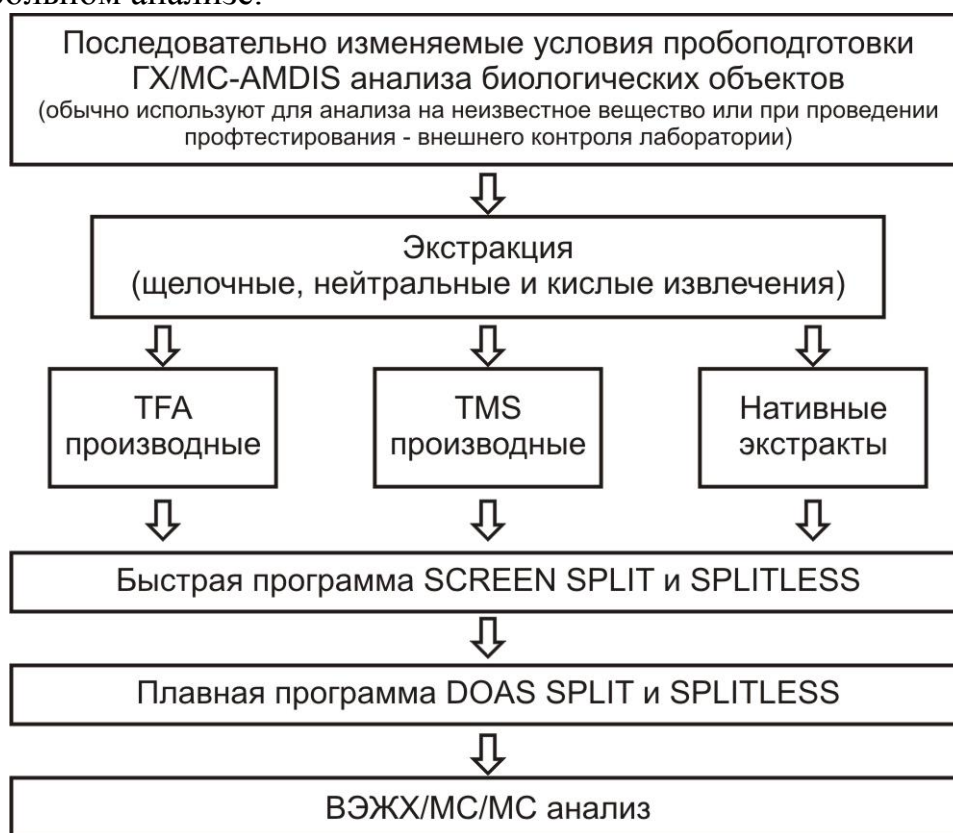


Рисунок 2. Применение методов ГХ/МС анализа с последовательно изменяемыми условиями.

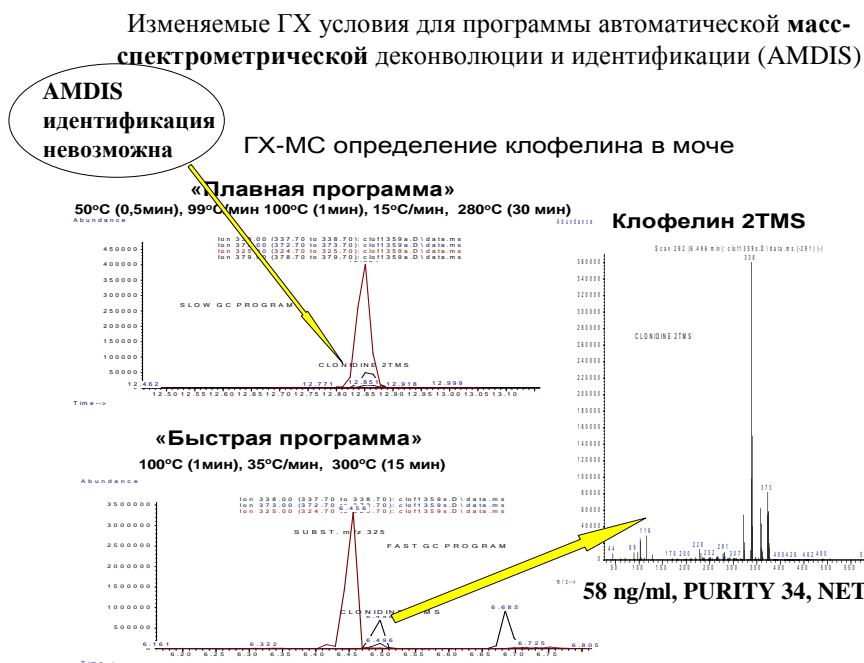


Рисунок 3. Хроматограммы (SCAN) пробы мочи содержащей клофелин.

При использовании «плавной» хроматографической программы наблюдали наложение на клофелин 2TMS созкстрактивного компонента, мешающего AMDIS идентификации. Применение «быстрой» программы позволило разделить пики мешающего компонента и клофелина 2TMS. Применение 4-х процедур позволило получить надежные результаты идентификации в наиболее сложных случаях хроматографических наложений, например, при определении клофелина в моче в виде TMS.

### Контроль качества выполнения измерений

Таблица 3. Воспроизводимость фиксированных времен удерживания на колонках HP-5MS.

Вещество	Лаб.1*	Лаб.2	Лаб.3	Лаб.4	Лаб.5	среднее	Станд. откл.
Никотин	6.76		6.75	6.77	6.87	6.79	0,06
Котинин	10.08		10.06	10.06	10.00	10.05	0,03
Кофеин	11.10		11.13	11.11	11.06	11.10	0,03
Димедрол	11.38		11.37	11.37	11.37	11.37	0,01
Карбамазепин	14.65		14.72			14.69	0,05
Метамфетамин ТФА	7.33	7.40	7.31	7.33		7.34	0,04
Грамадол	12.07			12.08		12.08	0,01
Морфин 2ТФА	14.10	14.18	14.13	14.15	14.09	14.13	0,04

Буторфанол 2ТФА	16.76	16.81				16.79	0,04
Кодеин ТФА	14.49			14.53	14.	14.50	0,03
Папаверин	19.71		19.58	19.70	48	19.66	0,07

Таблица 4. Метрологические параметры методики определения веществ по процедурам 1, 2, 3 (см. раздел Описание новой медицинской технологии).

Нижний предел обнаружения веществ в режиме многокомпонентного анализа полного сканирования с AMDIS идентификацией	70 нг/мл (морфин, амфетамин, диазепам)
Нижний предел обнаружения веществ в режиме мониторинга выбранных ионов SIM при количественном определении	10 нг/мл (морфин, тетрагидроканнабиноловая кислота)
Воспроизводимость фиксированных времен удерживания при их переносе с прибора на прибор	+/- 0.05 мин

### Акты внедрения

Эффективность методики подтверждена актами внедрения от следующих организаций:

1. Химико-токсикологическая лаборатория Ярославской областной клинической наркологической больницы.
2. Химико-токсикологическая лаборатория Наркологического диспансера Псковской области.
3. Химико-токсикологическая лаборатория Саратовской областной психиатрической больницы Святой Софии.
4. Химико-токсикологическая лаборатория ОГУЗ «Орловский наркологический диспансер».
5. Судебно-химическая лаборатория ОГУЗ «Бюро судебно-медицинской экспертизы» г. Белгорода
6. Судебно-химическая лаборатория Республиканского бюро судебно-медицинской экспертизы, Республика Татарстан, г.Казань
7. Судебно-химическая лаборатория ГУЗ «Калужское областное бюро судебно-медицинской экспертизы» г. Калуга
8. Химико-токсикологическая лаборатория Сургутского клинического психоневрологического диспансера. г. Сургут, Ханты–Мансийский автономный округ.
9. Химико-токсикологическая лаборатория ФУ «1080 Центральный военный госпиталь» 12 ГУ МО РФ, г.Сергиев-Посад Московской области.
10. Судебно-химическая лаборатория ГУ Бюро судебно-медицинской экспертизы, Республика Саха (Якутия) г. Якутск.
11. ФГУП «Антидопинговый центр» г. Москва.

## Список литературы

1. Савчук С.А. Система удаленной идентификации и распознавания объектов сложного состава. Патент на изобретение (19)RU(11) 77474 (13) (51) МПК G06K 17/00 (2006.01). Дата начала срока действия патента 15.07.2008. Опубликовано 20.10.2008 Бюл. №29.
2. Савчук С.А., Чибисова М.В., Апполонова С.А., Анохин Л.А., Способ выявления неизвестных веществ в биологических жидкостях пациентов, принимавших наркотические или психоактивные вещества. Положительное решение от 05 мая 2010 г. по заявке 2009109664/28(013081) от 18.03.2009.
3. Савчук С.А., Апполонова С.А. Способ идентификации наркотических и психоактивных веществ в биологических жидкостях Патент на изобретение RU 2390771 C1 МПК G01N 30/86 (2006 01) приоритет от 05 февраля 2009 г. Опубликовано 27.05.2010 бюлл. 15.
4. "Reconstructed Mass Spectra, A Novel Approach for the Utilization of Gas Chromatograph—Mass Spectrometer Data", Biller, J.E.; Biemann, K. Anal. Lett. 1974 7 515-528.
5. "Spectral Deconvolution for Overlapping GC/MS Components" Colby, B. N. J. Amer. Soc. Mass Spectrom. 1992 3 558-562.
6. "Software-Based Mass Spectral Enhancement to Remove Interferences from Spectra of Unknowns", Herron, N.R.; Donnelly, J.R.; Sovocool, G.W. J. Amer. Soc. Mass Spectrom. 1996 7 598-604.
7. "Automated Extraction of Pure Mass Spectra from Gas Chromatographic / Mass Spectrometric Data", Pool, W.G.; Leeuw, J.W.; van de Graaf, B. J. Mass Spectrom. 1997 32 438-443.
8. "Extraction of Mass Spectra Free of Background and Neighboring Component Contributions from Gas Chromatography/Mass Spectrometry Data" Dromey, R.G; Stefik, M.J.; Rindfleisch, T.C; Duffield, A.M. Anal. Chem. 1976 48 (9) 1368-1375.
9. "An Evaluation of Automated Spectrum Matching for Survey Identification of Wastewater Components by Gas Chromatography-Mass Spectrometry" Shackelford, W.M.; Cline, D.M.; Faas, L; Kurth, G. Analytica Chim. Acta 1983 146 25-27.
10. "Improvement of Algorithm for Peak Detection in Automatic Gas Chromatography-Mass Spectrometry Data Processing" Hargrove, W.F.; Rosenthal, D.; Cooley, P.C. Anal. Chem. 1981 53 538-539.
11. "Optimization and Testing of Mass Spectral Library Search Algorithms for Compound Identification" Stein, S.E.; Scott, D.R. J. Amer. Soc. Mass Spectrom. 1994 5 859-866.
12. Б.А. Руденко, С.А. Савчук, Е.С. Бродский. Хроматографическое определение обезболивающих наркотических средств (Обзор) Журнал Аналитической Химии 1996 Т51. N2. 182-201
13. Н.В. Веселовская, С.А. Савчук, Б.Н. Изотов, Свойства и анализ

- опиоидного анальгетика Трамадола (Обзор) Вопросы наркологии 1998, №2 С. 41-53
14. С.А.Савчук, Н.В.Веселовская, Е.С.Бродский, А.А.Формановский, В.В.Чистяков, Б.Н.Изотов, Применение хроматографии и хроматомасс-спектрометрии для изучения фармакокинетики и метаболизма пропофола, клофелина, фенциклидина и трамадола (Обзор) Хим.-Фарм. Журнал 1999, №10, с. 29-52.
  15. Н.В.Веселовская, С.А.Савчук, Б.Н.Изотов Хроматографический анализ фенциклидина, его метаболитов и аналогов в биологических жидкостях (обзор) // Судебно медицинская экспертиза 1999 г., №2 с.20-25.
  16. С.А.Савчук, А.Н.Веденин Применение программы фиксации времен удерживания при хромато-масс-спектрометрическом определении анализируемых веществ Российский химический журнал(Ж.Рос.хим.об-ва им. Д.И.Менделеева), 2003, т.XLVII, №1, с.141.
  17. С.А.Савчук, Е.А.Симонов, В.И.Сорокин, О.Б.Дорогокупец, А.Н.Веденин. Применение метода фиксации времен удерживания при хромато-масс-спектрометрическом и хроматографическом определении наркотических средств// Журнал Аналитической Химии , 2004, Т.59, №10, с.1059-1069.
  18. С.А.Савчук, Б.А.Руденко, Н.А.Давыдова, Е.С.Бродский, Т.Ф.Боровкова Определение анестезирующего препарата Кетамин в крови методом капиллярной газовой хроматографии с применением термоионного детектирования и хромато-масс-спектрометрии Журнал Аналитической Химии 1995 Т50. N12. С. 1324-1329
  19. С.А.Савчук, Е.С.Бродский, Б.А.Руденко, А.А.Формановский, И.В.Михура, Н.А.Давыдова //Хромато-масс-спектрометрическое определение продуктов биотрансформации анестезирующего препарата Кетамин Журнал Аналитической Химии 1997 Т52. N12. С. 1299-1311
  20. С.А.Савчук, Е.С.Бродский, А.А.Формановский, В.В.Ерофеев, Е.В.Бабанова, В.В. Чистяков, М.Л. Рабинович, О.А.Долина, Б.А.Руденко. Применение газовой хроматографии с селективным детектированием и хромато-масс-спектрометрии для идентификации метаболитов Кетамина и исследования процессов конъюгации Кетамина и его метаболитов в организмах человека и крыс //Журнал Аналитической Химии 1998 Т53. N.6. С. 663-670
  21. С.А.Савчук, Е.С.Бродский, А.А.Формановский, Е.В.Бабанова, Н.В.Веселовская, Б.Н.Изотов, Г.М. Родченков, В.В.Ерофеев, Б.А.Руденко Артефакты при хромато-масс-спектрометрическом определении препаратов для внутривенного наркоза (I). Трамадол, связь между структурой метаболитов и примесных веществ (II) Журнал Аналитической Химии 2000, Т.55, № 4, с.430-442.
  22. Лазарев В.В., Галибин И.Е., Савчук С.А., Изотов Б.Н., Веденин А.Н., Р.П.Васина. Фармакокинетика и метаболизм кетамина на фоне болюсного введения рентгеноконтрастных средств при рентгеноэндоваскулярных вмешательствах у детей //Ж. Анестезиологии и реаниматологии. 2001 №1 с.38-43.

23. Лазарев В.В., Поляев Ю.А., Савчук С.А., Изотов Б.Н. Влияние болюсного введения рентгеноконтрастных средств на фармакокинетику кетамина и течение анестезии при рентгенохирургических вмешательствах у детей Научно-практический журнал “Детская больница”. 2001 №2 с.12-17.
24. Симонов Е.А., Савчук С.А., Сорокин В.И. Кислун Ю.В. Ключев Е.А. //Оксибутират, его прекурсоры и метаболиты Наркология 2002 №3 с.12-19.
25. С.А.Савчук, А.Н.Веденин, А.В.Смирнов, Е.А.Симонов, О.Б.Дорогокупец, В.И.Сорокин, Ю.В.Кислун Исследование влияния продуктов и лекарственных препаратов на правильность определения опиатов и некоторых других наркотических средств в биологических объектах (моче). Лабораторный журнал 2002 №2 (2) декабрь 18-23.
26. А.М.Григорьев, С.А.Савчук Обзорные библиотеки удерживания (ГЖХ). Опыт согласования значений. Полученных для разных пневматических режимов Тезисы докладов Всероссийской конференции «Теория и практика хроматографии. Хроматография и нанотехнологии Самара 6-9июля 2009 г. с. 96.
27. Савчук С.А., Родченков Г.М., Щербакова Т.Г., Кирюшин А.Н. Сравнительное ГХ-МС исследование метаболизма обезболивающих наркотических средств и способ идентификации новых метаболитов. Тезисы докладов Всероссийской конференции «Теория и практика хроматографии. Хроматография и нанотехнологии Самара 6-9июля 2009 г. с. 186.
28. Савчук С.А., Родченков Г.М., Апполонова С.А., Никитина Н.М. Опыт практического применения новых ГХ-МС методик в системе химико-токсикологических лабораторий и спортивном тестировании Тезисы докладов Всероссийской конференции «Теория и практика хроматографии. Хроматография и нанотехнологии Самара 6-9июля 2009 г. с. 58



## Приложение 1.

### Перечень библиотек масс-спектров, используемых для идентификации веществ, относящихся к наркотическим средствам, психотропным и сильнодействующим веществам

Название библиотеки	Формат	Для какой процедуры использовать	Последовательность использования AMDIS библиотек при автоматической идентификации
SAV_27R	AMDIS формат, 350 веществ с временами удерживания	1, 2	1
SAV_stim02		1, 2	2
pub_sav50_sudmed_464 _amdislib_20141027	AMDIS формат, 464 веществ с временами удерживания	1,2	1
SAV_TMS		3	1
pub_SAV_TMSr4_sudmed_156 _amdislib_20141027	AMDIS формат, 156 веществ	3	1
SUDMED_1465	AMDIS, ChemStation PBM, NIST, 1465 спектров	3	2
PMW_TOX3	AMDIS формат, 6360 спектров	1,2,3	2
NIST 08	PBM формат, 175 000 спектров	1,2,3	Только для «ручной» идентификации
PMW_TOX3, 2007	PBM формат, 6360 спектров	1,2,3	Только для «ручной» идентификации
Wiley 7n	PBM формат, 392086 спектров	1,2,3	Только для «ручной» идентификации

## Приложение 2.

### Оборудование общелабораторного назначения и реактивы

№ п/п	Тип оборудования
1.	Автоматические пипетки вместимостью 200-1000 мкл и наконечники к ним.
2.	Автоматические пипетки вместимостью 10-100 мкл. И наконечники к ним.
3.	Микрошприцы хроматографические на 10 мкл Hamilton, Agilent Technologies для автоинжектора.
4.	Виалы стеклянные с завинчивающейся пробкой и тефлонированной мембраной вместимостью 2 мл (для работы с автоинжектором) Agilent Technologies, Thermo.
5.	Виалы стеклянные с завинчивающейся пробкой и тефлонированной мембраной вместимостью 4 мл Agilent Technologies.
6.	Виалы стеклянные с завинчивающейся пробкой и тефлонированной мембраной вместимостью 9 мл (16 мм x 100 мм) или экстракционные пробирки TOXI-LAB Tubes A-100.
7.	Стекломерная колба вместимостью 10-мл.
8.	Стекломерный цилиндр вместимостью 100 мл
9.	Лабораторные штативы под виалы 16 мм x 100 мм
10.	Выпаривательные чашки-колпачки TOXI-LAB (можно заменить виалами Agilent Technologies вместимостью 4 мл).
11.	Подставка для работы с алюминиевыми выпаривательными чашками-колпачками TOXI-LAB Omega-12 (можно заменить металлическим лабораторным штативом под виалы вместимостью 4 мл).
12.	Весы аналитические пределом измерения 0.1 мг.
13.	Центрифуга лабораторная, 3-6 тыс об/мин.
14.	Центрифуга лабораторная, 14 тыс об/мин.
15.	Патроны для твердофазной экстракции AccuBONDII EVIDEX 3 мл/200 мг. Agilent Technologies.
16.	Устройство для твердофазной экстракции, включающее штатив для патронов (картриджей) для твердофазной экстракции с регулятором вакуума, предохранительным клапаном с вакуумным мембранным насосом, обеспечивающий вакуум (20 мм. Рт. Ст.)
17.	Ультразвуковая баня мощностью не менее 240 Вт.
18.	Шейкер орбитальный
19.	Вибромиксер
20.	Фильтры полимерные 0.5 мкм для фильтрации экстрактов
21.	Фен лабораторный мощностью не менее 800 Вт.
22.	Лабораторная посуда Shott Duran (квадратные стеклянные бутылки для

	реактивов) с пластиковыми завинчивающимися пробками вместимостью 50, 100, 250, 500, 1000 мл.
23.	Вставки в виалы, Conical Inserts with Polymer Feet 250 µL glass inserts with polymer feet and mandrel interior <b>100/pk 5181-1270</b>

Дериватизирующие агенты для ГХ-МС анализа

Наименование	ед. изм.	Кол-во на 1 анализ, мкл
Пентафторпропионовый ангидрид, pentafluoropropionic anhydride, PFPAА	мл	100
Пентафторпропанол. Pentafluoropropanol .	мл	50
Трифторуксусный ангидрид, trifluoroacetic anhydride, TFAА	мл	100
N,O –бис(триметилсилил—трифторацетамид, N,O-bis(trimethylsilyl)-trifluoroacetamide) with 1% Trimethylchlorosilane, BSTFA + 1% TMCS или N-метил (N-триметилсилил—трифторацетамид, N-methyl(N-trimethylsilyl)-trifluoroacetamide, MSTFA *	мл	100
*При наличии в лаборатории отдельного прибора для процедуры определения веществ в виде TMS производных		
Уксусный ангидрид	мл	100
Пиридин	мл	100
Beta-глюкуронидаза		

Растворители и реактивы для ГХ-МС анализа

Наименование	Ед. изм.	Количество На 1000 анализов
Гелий марки «А». 99.995% ТУ 51-940-80	Баллон	0.4
Метанол для ВЭЖХ (HPLC grade)	л	0.6

Пропанол-2 «ОСЧ 13-5»	л	0.9
Гептан ХЧ	л	0.9
Этилацетат ХЧ	л	0.9
Изооктан (триметилпентан) ХЧ	л	1.5
Метилен хлористый ХЧ «Lichrosolv»	л	2.1
1,2-Дихлорэтан	л	0.9
Натрия хлорид ч.д.а.	кг	1.5
Ацетон	л	0.1
Толуол	л	0.1
Карбонат натрия ч.д.а.	кг	0.2
Бикарбонат натрия ч.д.а.	кг	0.2
Гидроксид натрия ч.д.а.	кг	0.6
Кислота соляная ХЧ	л	0.6
Аммиак 10% водный	л	0.6
Дифениламин >99%	г	0.1

### Приложение 3

#### Методика определения 11- нор –дельта- 9-карбокситГК в моче

##### Реактивы

Для щелочного гидролиза используют NaOH или КОН.

1. 5N раствора едкого натрия – 200г/л.

Приготовление 5М. К 2г NaOH добавляют дист. воду до объема 10 мл.

Приготовление 5М КОН. К 2.8г КОН добавляют дист. воду до объема 10 мл.

**Приготовление стандартных растворов (смесей).** Исходный стандартный раствор 100 мкг/мл 11- нор –дельта- 9-карбокситГК в метаноле.

**Базовый стандартный раствор карбокситГК (10 мкг/мл) в метаноле.**

К 900 мкл метанола добавить 100 мкл исходного раствора карбокситГК (100 мкг/мл).

Или К 450 мкл метанола добавить 50 мкл исходного раствора карбокситГК (100 мкг/мл).

### **Базовый стандартный раствор карбокси-ТГК (0,1 мкг/мл)**

К 10 мл метанола добавить 100 мкл раствора 10 мкг/мл.

Или к 1.5 мл 15 мкл р-ра 10 мкг/мл.

### **Калибровочные растворы карбокси-ТГК**

#### **а. 6 нг/мл Карбокси-ТГК-калибратор.**

- 1) Внести 9.4 мл мочи в 10-мл стеклянную мерную колбу.
- 2) Добавить 600 мкл раствора карбокси-ТГК (0,1 мкг/мл).

#### **б. 15 нг/мл Карбокси-ТГК-калибратор.**

- 1) Внести 8.5 мл мочи в 10-мл стеклянную мерную колбу.
- 2) Добавить 1500 мкл раствора карбокси-ТГК (0,1 мкг/мл).
- 3) Доведите объем до метки (10 мл) мочой.

#### **с. 50 нг/мл Карбокси-ТГК-калибратор.**

- 1) Внести 10 мл мочи в 10-мл стеклянную мерную колбу. Отобрать и отбросить автоматическим дозатором 50 мкл мочи из пробирки
- 2) Добавить **50** мкл раствора карбокси-ТГК (10 мкг/мл).

#### **д. 100 нг/мл Карбокси-ТГК-калибратор.**

- 1) Внести 10 мл мочи в 10-мл стеклянную мерную колбу. Отобрать и отбросить автоматическим дозатором 100 мкл мочи из пробирки
- 2) Добавить **100** мкл раствора карбокси-ТГК (10 мкг/мл) в 10-мл мерную колбу.

#### **е. 150 нг/мл Карбокси-ТГК-калибратор.**

- 1) Внести 10 мл мочи в 10-мл стеклянную мерную колбу. Отобрать и отбросить автоматическим дозатором 150 мкл мочи из пробирки
- 2) Добавьте **150** мкл раствора карбокси-ТГК (10 мкг/мл) в эту 10-мл мерную колбу.

### **Подготовка пробы**

**Гидролиз:** к 3 мл мочи добавить 0.5 мл 5N раствора NaOH, выдерживать при 50°C в течение 20 минут.

### **Выделение определяемых веществ жидкостной экстракцией.**

Гидролизат подкисляют до pH 2-3 добавлением 250-350 мкл конц. соляной кислоты, экстрагируют 3 мл смеси изооктан-этилацетат 7:1 на орбитальном шейкере 5 мин, центрифугируют (3 мин при 3000 об/мин), отбирают верхний органический слой, добавляют 30 мкл р-ра ВС дифениламина в ацетонитриле конц. 20 мкг/мл (до конц. ВС в пробе 200 нг/мл), упаривают в вакуумном концентраторе и дериватизируют.

### **Дериватизация. (вариант 1). Алкилирование/ацетилирование пентафторпропионовый ангидрид (PFPA) + пентафторпропанол (PFPOH)**

К сухому остатку добавить 50 мкл PFPA и 25 мкл PFPOH, выдерживать 30 мин при 90°C, упарить остаток реагента растворить в 100 мкл этилацетата. 1 мкл в хроматограф.

**Дериватизация. (вариант 2). Силилирование.** К сухому остатку добавить 70 мкл BSTFA выдержать 30 мин при 70°C, 1 мкл в хроматограф.

### **Условия ГХ-МС анализа**

Условия двух вариантов ГХ/МС хроматографирования и детектирования тетрагидроканнабиноловой кислоты в моче представлены ниже.

#### **1. Определение тетрагидроканнабиноловой кислоты в виде производного с пентафторпропионовым ангидридом и пентафторпропанолом**

**Метод 1 SCREEN:** 100°C(1 мин) 35°C/мин300°C (15 мин).

Диапазон масс m/z 41 – 650 а.е.м.

Характеристические ионы ДФА-PFP m/z 315, 222, 167 время удерживания 5.20 мин

Характеристические ионы ТГК-COOH-PFP m/z 607. 622, 459 время удерживания 7.68 мин

**ГХ-МС Метод 2 DOAS:** 50°C (0,5мин.), 99°C/мин 100°C (1мин.), 15°C/мин, 280°C (30 мин.)

Время удерживания ДФА- PFP 9.00 мин

Время удерживания ТГК-ССООН-PFP 14.49 мин

#### **2. Определение тетрагидроканнабиноловой кислоты в виде производного с BSTFA**

**ГХ-МС Метод 1:** 100°C(1 мин) 35°C/мин300°C (15 мин).

Диапазон масс  $m/z$  41 – 650 а.е.м.

Характеристические ионы ТГК-COОН-TMS  $m/z$  371, 472, 488 время удерживания 9.41 мин

### Методика определения клофелина в моче

**Ввод внутреннего стандарта.** К 3 мл пробы мочи добавляют 30 мкл р-ра ВС дифениламина в ацетонитриле конц. 20 мкг/мл (конц. ВС в пробе 200 нг/мл).

**Выделение определяемых веществ жидкостной экстракцией.** К 5 мл пробы с введенным ВС добавляют 300 мкл 25% водного NH<sub>4</sub>ОН и экстрагируют 10 мл смеси гексан – изопропанол 9:1, центрифугируют, переносят органический слой в виалу вместимостью 10 мл и упаривают экстракт.

**Получение производных.** К сухому экстракту добавляют 70 мкл (BSTFA), выдерживают 30 мин при 70<sup>0</sup>С, 1 мкл пробы вводят в хроматограф.

**Условия ГХ-МС анализа. ГХ-МС Метод 1 SCREEN: 100<sup>0</sup>С(1 мин) 35<sup>0</sup>С/мин300<sup>0</sup>С (15 мин).**

Диапазон масс  $m/z$  41 – 650 а.е.м.

Характеристические ионы ДФА-TMS  $m/z$  201, 255, 270 время удерживания 2 .73 мин. Характеристические ионы КЛОФЕЛИН-TMS  $m/z$  266, 301

КЛОФЕЛИН-2TMS  $m/z$  338, 373 время удерживанмя 6.40 мин

Из BSTFA на клофелин может накладываться ион  $m/z$  379.

Примечание: для дериватизации клофелина можно использовать реактив N-Methyl-N-(trimethylsilyl)trifluoroacetamide (CAS 24589-78-4). Дериват КЛОФЕЛИН-2TMS  $m/z$  338, 373 время удерживанмя 6.40 мин.

Примечание: на клофелин может накладываться фоновый пик с базовым ионом  $m/z$  325 (из реактива).

### Приложение 4.

#### Пример веществ различных групп, определяемых по процедуре 1

	Целевые вещества	RT DOAS, МИН	$m/z$ , в скобках интенсивность
1.	$\Delta^8$ -Tetrahydrocannabinol,	15.46	314(160)299(20)271(90)258(100) 231(270)193(60)174(40)
2.	2-Amino-5-Chlorbenzophenone	12.69	195 (11) 214 (6 ) 230 (100) 232 (40)
3.	2-Amino-5-Nitrobenzophenone	15.11	165 (180) 195 (29) 241 (100) 242 (84)
4.	2-Amino-5-nitrodenzophenone TFA	13.45	105 (100) 191 (37) 269 (40) 338 (62)
5.	2-Methylamino-5-Chlorbenzophenone	13.07	193(38) 228(45) 244 (91) 245 (100)
6.	2-METHYLAMINOPROPIOPHENON	6.68	
7.	2-Pyrrolidinone, 1,5-dimethyl-3,3-diphenyl	13.60	
8.	3,4-Methylenedioxy-amphetamine (MDA),	8.01	179(3)136(40)105(3)77(12)44(100)
9.	3,4-methylenedioxy-N-ethylamphetamine (MDEA)	8.90	135(10)105(2)72(100)44(20)
10.	3-N-pentyl-.delta.9-tetrahydrocannabinol	15.63	314(80)299(100)271(45)256(25)321(80)
11.	4-ACETYLAMINOANTIPYRINE-9 analginе met	14.17	56(100) 84 (58)203(40) 245(45)
12.	4-Methylthioamphetamine (MTA)	8.77	181(3)166(2)138(30)122(15)91(7)78(4)44 (100)

13.	4-OH-Methamphetamine 2TFA	8.69	110(22)154( 100 )230 (203)
14.	6-ACETYL-MORPHINE, 6-MAM	14.95	364 (100) 311 (8) 423 (57 )
15.	6-MAM, 6-AC Morphine	16.22	327(100)284(10)268(100)215(35)204(15) 162(15)146(25)
16.	Acetaminophen	9.87	151(10)109(400)80(10)53(5)43(10)
17.	Acetaminophen TFA (Paracetamol TFA)	8.86	108 <sub>100</sub> 205 <sub>51</sub> 247 <sub>26</sub>
18.	Adiphenine	13.76	167(10)152(5)99(10)86(100)
19.	Alphaprodine	10.89	261(5)187(50) 172(100)144(20)129(15)84(35)57(20)42(20)
20.	Aminochlorbenzophenone TFA	12.21	180 <sub>43</sub> 258 <sub>38</sub> 327 <sub>71</sub> 329 <sub>23</sub>
21.	Aminochlorbenzophenone TFA	12.17	180 40 258 37 327 70
22.	Amitriptylinoxide -(CH3)2NOH	15.12	204 <sub>31</sub> 219 <sub>39</sub> 232 <sub>100</sub>
23.	Amitriptyline	13.74	58 <sub>100</sub> 202 <sub>4</sub> 215 <sub>2</sub>
24.	Amobarbital	10.14	141 (80) 156 (100)
25.	Amphetamine,	4.584	120(5)115(3)91(15)65(10)44(100)
26.	Amphetamine TFA	6.18	91 <sub>49</sub> 18 <sub>97</sub> 140 <sub>100</sub>
27.	Amphetamine TFA	6.31	140(100)118(100)91(60)65(20)
28.	p-OH-Amphetamine TFA	7.77	140 <sub>100</sub> 203 <sub>12</sub> 230 <sub>75</sub>
29.	Analgin -M	12.47	299(100)230(77)83(62)56(98)
30.	ANALGINE MET.	12.34	56(100)84(75)203(90)
31.	ANALGINE-M TFA	13.15	56(90)123(70)216(80)313(100)
32.	Androst-2-en-17-one, (5.alfa.)	14.11	91(80)161(55)218(100)272(75)
33.	ANDROSTERONE TFA	14.85	342(85)368(25)386(100)
34.	Anhydroecgonine	7.28	152 (100) 166 (7) 181 (32)
35.	Aprophene TAREN comp. major	13.95	86(100)99(47)181(40)
36.	Aprophene	13.94	325(2)310(5)253(3)181(20)165(15)99(30) 86(100)
37.	Atropine	13.77	94(25)124 (100) 289(23)
38.	Barbital	8.20	141( 94 )156 (100)
39.	BENZOIC ACID 4-AMINO-2-DIETHYLAMINOETHER	12.56	86(100)99(45)120(25)
40.	Benzphetamine TFA	11.23	91 <sub>100</sub> 148 <sub>90</sub>
41.	Benzylamphetamine	11.16	148(90)91(100)65(10)
42.	Bromantane TFA	13.00	247 <sub>100</sub> 343 <sub>20</sub> 360 <sub>22</sub> 402 <sub>21</sub>
43.	Bromantane-M(OH) TFA	14.94	247 <sub>36</sub> 269 <sub>8</sub> 515 <sub>8</sub>
44.	Butorphanol (stadol)2TFA	14.76	350 <sub>30</sub> 351 <sub>9</sub> 464 <sub>100</sub> 465 <sub>21</sub>
45.	Butorphanol (stadol)-M TFA	15.91	350 <sub>24</sub> 414 <sub>17</sub> 464 <sub>100</sub> 465 <sub>22</sub>
46.	Caffeine	11.09	194(100)165(6,5)109(60,4)82(28,4)67(41,5) 55(38,7)42(14,0)
47.	Cannabichromene	14.91	314(10)299(5) 231(100)174(20)
48.	Cannabicomaronone	15.13	328(60)313(20) 285(100)271(20)257(50)243(20)214(50)202(15)185920)
49.	Cannabidiol	14.92	314(10)246(13) 231(100)193(10)174(10)
50.	Cannabigerol	16.01	316(15)247(15)231(40)193(100)123(30)
51.	Cannabinol,	16.20	310(10)295(100)238(15)223(5)
52.	Carbamazepine	14.64	165(25) 193(100) 236(28)
53.	CARBAMAZEPINE MET	12.87	151(25)179(100)207(80)
54.	CARBAMAZEPINE MET/artifact	12.18	16(25)193(100)204(20)
55.	Carbamazepine-10,11-epoxide	12.88	151 (23) 179 (100) 207 (81)
56.	CARBAMAZEPINE-M (ACRIDINE)	11.00	151 (9) 178 (23) 179 (100)
57.	CARPHEDON	13.57	160 <sub>93</sub> 174 <sub>100</sub> 218 <sub>22</sub>
58.	Carphedon 2TFA	9.63	270 <sub>100</sub> 290 <sub>5</sub> 367 <sub>27</sub>



59.	CARPHEDON Nitril	11.60	104 <sub>100</sub> 173 <sub>3</sub> 200 <sub>30</sub>
60.	CATHINE, NORPSEUDOEPHEDRINE	6.53	140(100)203(10)230(20)
61.	Cathine TFA (orpseudoephedrine TFA)	6.40	140 <sub>100</sub> 203 <sub>6</sub> 230 <sub>11</sub>
62.	Chlorphenamine-M (bis-nor-) AC	13.90	167 <sub>41</sub> 203 <sub>61</sub> 216 <sub>100</sub> 218 <sub>34</sub>
63.	CHLORPHENIRAMINE	12.41	167(25)203(100)
64.	Chlorpheniramine	12.41	167 <sub>20</sub> 203 <sub>100</sub> 205 <sub>33</sub>
65.	Chlorpromazine	16.12	232 <sub>6</sub> 272 <sub>13</sub> 274 <sub>5</sub> 318 <sub>22</sub> 320 <sub>8</sub>
66.	Chlorpromazine	16.00	58 <sub>100</sub> 232 <sub>9</sub> 272 <sub>14</sub> 318 <sub>24</sub>
67.	Chlorpromazine,	15.94	318(50)272(30)232(15)86(30)58(100)
68.	Chlorprothixene	15.92	58 (100) 221 (15)
69.	Clobenzorex TFA	12.97	125 <sub>100</sub> 230 <sub>23</sub> 264 <sub>15</sub>
70.	Clozapine	20.32	192 (227) 243 (256)
71.	Coaxil (Tianeptine)-M	25.29	228 (100) 255 (46) 283 (24) 297 (23) 311 (26) 390 (18)
72.	Cocaethylene	14.11	196 83 272 12 317 17
73.	Cocaine	13.76	82 <sub>100</sub> 182 <sub>96</sub> 272 <sub>9</sub> 303 <sub>20</sub>
74.	Cocaine	13.80	303(10)272(5)198(5)182(550)94(250)82(6 00)
75.	Cocaine-M (methylecgonine) TFA	7.69	182 (100) 264 (10) 295 (25)
76.	CODEINE	15.18	299(100),282(10),229(30),162(40)
77.	Codeine TFA	14.49	282(100),395(70),266(15),225(15)
78.	Cropropamide	8.98	69 <sub>75</sub> 100 <sub>100</sub> 168 <sub>33</sub>
79.	Crotethamide	8.44	69 <sub>62</sub> 86 <sub>100</sub> 154 <sub>33</sub>
80.	Desomorphine	14.17	214 <sub>30</sub> 228 <sub>17</sub> 256 <sub>15</sub> 270 <sub>38</sub> 271 <sub>100</sub>
81.	Desomorphine TFA	13.213	324 <sub>18</sub> 350 <sub>12</sub> 352 <sub>18</sub> 367 <sub>100</sub>
82.	Diazepam	15.58	221 <sub>27</sub> 256 <sub>100</sub> 283 <sub>90</sub> 283(250)256(300)241(50) 221(100)
83.	Dicaine (Tetracaine)	13.88	150 176 193
84.	Diethyltryptamine	11.74	216(3)144(3)130(5)115(3)86(100)58(5)42 (2)
85.	Diphenhydramine	11.37	58(290)73(60)152(20)165(40)
86.	Doxepin	13.95	58(100),152(5),165(5)178(5)189(5)202(3) 279(3M)
87.	Doxepine	14.01	58 100 165 2 189 1
88.	Ecgonine N,O-di TFA	6.06	164 100 194 28 232 40 308 36
89.	Ephedrine,	7.04	58(100)77(15)91(3)
90.	Ephedrine TFA	7.13	110 <sub>24</sub> 154 <sub>100</sub> 244 <sub>3</sub>
91.	Ephedrine 2TFA	7.21	244(10)154(100)110(20)69(10)
92.	Etamivan TFA	10.17	247, 318,319
93.	Ethamivan	11.54	151 (100) 222 (26) 223 (22)
94.	Ethylephrine TFA	8.04	126 <sub>28</sub> 154 <sub>100</sub> 217 <sub>3</sub>
95.	Ethylmorphine	15.39	313(100)284(25)256(15)243(20)214(25)1 62(45)
96.	Ethylmorphine TFA	14.78	409(100)380(20)296(100)281(50)266(30)
97.	Etofylline TFA	12.07	206 (37) 207 (38) 320 (100)
98.	Fenazepam-Hy TFA	13.51	224 <sub>28</sub> 226 <sub>28</sub> 336 <sub>17</sub> 405 <sub>40</sub> 407 <sub>49</sub>
99.	Fenfluramine TFA	7.63	140 <sub>31</sub> 159 <sub>17</sub> 168 <sub>100</sub>

100.	Fenproporex TFA	10.09	118 <sup>59</sup> 140 <sup>44</sup> 152 <sup>13</sup> 193 <sup>100</sup>
101.	Fentanyl	18.17	245(400)189(125)146(220)132(30)105(60) 91(30)77(50)
102.	Fludiazepam	15.88	273 (53 )274 (100) 283 (37) 302 (93)
103.	Haloperidol-M (N-desalkyl-) AC	14.17	210 (70) 237 (30) 255 (36) 309 (10)
104.	Haloperidol-M -2H2O	9.67	127 (33) 154 (27) 189 (100) 191 (33)
105.	Heroine,	17.29	369(140)327(200)310(110)268(150)215(70) 204(65)
106.	Hexobarbital	11.34	155 (23) 157 (37) 221 (100)
107.	Hydrocodone	15.72	242 <sup>51</sup> 243 <sup>33</sup> 270 <sup>11</sup> 284 <sup>13</sup> 299 <sup>100</sup>
108.	Hydromorphone TFA	14.83	325 <sup>71</sup> 352 <sup>16</sup> 381 <sup>100</sup>
109.	Imipramine	13.98	193 (35) 234 (100) 280 (29)
110.	ISTD DPA	9.27	169 <sup>100</sup> 168 <sup>63</sup> 167 <sup>33</sup>
111.	Ketamine TFA	12.08	262 (35) 270 (63)276 (16) 298 (20) 305 (14)
112.	Levorphanol TFA	12.33	150 <sup>71</sup> 285 <sup>81</sup> 352 <sup>84</sup> 353 <sup>100</sup>
113.	MDA TFA	9.35	135 <sup>100</sup> 162 <sup>40</sup> 275 <sup>13</sup>
114.	MDA-M/precursor-3	7.86	105 <sup>7</sup> 135 <sup>100</sup> 136 <sup>10</sup> 178 <sup>23</sup>
115.	MDMA TFA	10.40	154 <sup>100</sup> 162 <sup>79</sup> 289 <sup>15</sup>
116.	Meconin,	10.31	194(90) 176(40)165(100)147(80)
117.	Mefenorex TFA	10.26	118 <sup>44</sup> 140 <sup>49</sup> 216 <sup>100</sup> 218 <sup>43</sup>
118.	Meperidine	10.46	172 <sup>27</sup> 218 <sup>20</sup> 247 <sup>35</sup> 247(40)232(10) 218(23)190(8) 172(30)71(100)57(25)42(23)
119.	Meprobamate	10.74	144(20),114(20),96(30),83(100),71(50),62 (40),55(80)
120.	Mescaline TFA	10.91	181 <sup>100</sup> 194 <sup>33</sup> 307 <sup>32</sup>
121.	Mescaline,	9.93	211(30)182(100)167(60)151(20)139(10)
122.	Methadone,	13.38	72(100)91(3)115(3)165(3)178(3)223(4)29 4(5)
123.	Methamphetamine	5.13	58(100)65
124.	Methamphetamine TFA	7.35	110 <sup>28</sup> 118 <sup>32</sup> 154 <sup>100</sup> 154(100)118(45)110(50) 91(23)69(20)
125.	Methaqualone,	13.52	233 <sup>30</sup> 235 <sup>100</sup> 250 <sup>30</sup> 250(30) 235(100)217(5)207(5)143(5)132(10)
126.	Methorphan	13.38	171 <sup>39</sup> 214 <sup>41</sup> 271 <sup>100</sup>
127.	Methoxyphenamine TFA	8.90	91 <sup>50</sup> 110 <sup>60</sup> 121 <sup>30</sup> 148 <sup>100</sup> 154 <sup>99</sup>
128.	Methylaminochlorbenzophenone TFA	12.51	236 (96) 288 (22) 307 (16) 340 (20)
129.	Methylaminopropiophenon	6.68	105(5)77(15)58(100)42(5)
130.	Methylenedioxy-meth-amphetamine (MDMA),	8.50	193(1)135(5)77(5)58(100)
131.	Methylphenidate	11.40	180 <sup>100</sup> 150 <sup>8</sup>
132.	Methylphenidate	10.31	172(3)150(5)91(15)84(100)65(3)56(10)

133.	Morphine 2TFA	14.10	364 <sup>100</sup> 477 <sup>25</sup>
134.	Morphine mono-TFA	14.44	268 <sup>100</sup> 381 <sup>56</sup> 382 <sup>13</sup>
135.	Morphine,	15.58	285(120)268(20)215(40)162(50)42(45)
136.	N,N-Dimethyltryptamine	10.65	188(10)143(5)130(10)115(5)77(5) 58(100)42(5)
137.	N,N-DIMETHYLTRYPTAMINE		
138.	Naltrexone 2TFA	15.61	420 <sup>40</sup> 436 <sup>29</sup> 492 <sup>19</sup> 533 <sup>100</sup>
139.	Naltrexone-M TFA	14.40	518 <sup>73</sup> 534 <sup>51</sup> 632 <sup>21</sup>
140.	Naltrexone-M TFA	16.09	422 <sup>13</sup> 480 <sup>14</sup> 494 <sup>50</sup> 535 <sup>100</sup>
141.	Nicotine	6.76	161(40)162(40)133(80)84(280)42(60)
142.	Nikethamide	8.76	78 <sup>38</sup> 106 <sup>100</sup> 177 <sup>46</sup>
143.	Nitrazepam	18.85Doas	206 234 253 264 280
144.	Nordazepam		241 <sup>89</sup> 242 <sup>100</sup> 269 <sup>87</sup>
145.	Norephedrine TFA	6.34	140 <sup>100</sup> 203 <sup>6</sup> 230 <sup>11</sup>
146.	Norfenyramine TFA	12.57	167 (41) 169 (70) 182 (100)
147.	norketamine	11.10	
148.	Norketamine TFA	10.83	239 (54) 256 (72) 275 (50) 284 (100)
149.	Nortriptyline	13.86	44(100)202(5)215(3)
150.	Noscapine	27.10	220(100)205(20)
151.	Octopanine TFA	7.93	287,315,328
152.	Oxazepam	14.80	205 <sup>96</sup> 233 <sup>75</sup> 239 <sup>91</sup> 268 <sup>100</sup>
153.	Oxycodone	16.43	315(100)300(5)281(10)258(20) 230(50)201(20)187(17)140(17)115(17)
154.	Papaverine,	19.70	338(100)324(90)308(30)293(20)
155.	Phenazepam	18.10	315 319 321 350
156.	Phencyclidine	11.61	242(40)200(100)186(20)166(17)117(10)9 1(30)
157.	Phendimetrazine	DPATFA 9.13	85 <sup>91</sup> 117 <sup>7</sup> 191 <sup>13</sup>
158.	Phendimetrazine	7.950	191(15)117(10)105(10)85(90)70(15)57(10) 0)42(50)42(50)
159.	Pheniramine	11.19	167 (15) 168 (36) 169 (100) 182 (3)
160.	Phenproporex	9.160	97(100)68(10)56(22)
161.	phentermine 4.968		
162.	Phentermine TFA	6.34	114 (24) 132 (45) 154 (100)
163.	Phenylephrine TFA	8.18	140 <sup>100</sup> 328 <sup>7</sup> 342 <sup>3</sup>
164.	Prolintane	9.51	126 <sup>100</sup> 174 <sup>6</sup>
165.	Promazine	14.67	199 (34) 238 (40) 284 (60)
166.	Promedol (Trimeperidine)	11.14	186 100 201 18
167.	Propoxyphene	13.54	58 <sup>100</sup> 91 <sup>4</sup> 115 <sup>3</sup> 117 <sup>1</sup>
168.	Propylcannabinol	14.65	282(18)267(100)238(20)223(10)
169.	Pseudococaine	10.97	82 (96) 182 (100) 303 (22)
170.	(+)-PSEUDOEPHEDRINE	7.04	58(100)77(15)91(3)
171.	Pseudoephedrine TFA	7.52	110 <sup>24</sup> 154 <sup>100</sup> 244 <sup>3</sup>
172.	Pseudoephedrine 2TFA	7.70	154(100)110(60)69(50)56(20)
173.	Scopolamine	14.64	138, 154, 303
174.	Sibitramine	10.96	72 <sup>14</sup> 114 <sup>100</sup> 115 <sup>10</sup>

175.	Sibutramine-M (bis-nor-) TFA	10.90	137 <sub>30</sub> 165 <sub>100</sub> 263 <sub>6</sub>
176.	Sibutramine-M (nor-) TFA	11.92	140 <sub>28</sub> 154 <sub>35</sub> 196 <sub>100</sub>
177.	Sidnocarb TFA	14.36	91 <sub>100</sub> 119 <sub>29</sub> 230 <sub>18</sub> 299 <sub>3</sub>
178.	Sinephrine TFA	8.17	140 <sub>100</sub> 328 <sub>16</sub> 342 <sub>6</sub>
179.	Struchnine	27.72	333 (34) 334 (100) 335 (51)
180.	Tenocyclidine	11.609	249(40)206(55)192(15)165(80)123(20)110(15)97(100)84(22)
181.	Trifluopeazine	17.62	407(80)306(30)280(20)266(30)248(30)141(40)113(100)70(70)
182.	Trifluoropromazine	13.90	248(10)234(10)86(20)58(100)
183.	Trimeperazine,	14.45	298(40)252(15)198(15)180(13)58(100)
184.	TRIMEPRAZINE	14.47	58 <sub>100</sub> 198 <sub>10</sub> 252 <sub>7</sub> 298 <sub>21</sub>
185.	Tropacocaine	12.05	245(30)140(10) 124(100)105(20) 94(40)82(80)67(20)42(23)

## Приложение 5.

### Применение методов ГХ-МС и ВЭЖХ-МС/МС для определения наркотических веществ в волосах

<sup>1</sup>Савчук С.А., <sup>2</sup>Никитина Н.М., <sup>3</sup>Зулаева А.С., <sup>4</sup>Несмеянова Н.И., <sup>4</sup>Константинова С.Д.

1 – Национальный научный центр наркологии МЗ.

2- Наркологический диспансер Псковской области.

3- Городское бюро судебно-медицинской экспертизы, Москва.

4 – Бюро судебно-медицинской экспертизы, Якутск.

К обнаружению веществ в образцах волос в последние годы увеличивается интерес судебной и клинической токсикологии. Анализ волос расширяет возможности химико-токсикологических лабораторий по обнаружению наркотических и лекарственных веществ в организме человека. Волосы как объект имеют некоторые преимущества перед мочой или кровью, такие как наиболее долгое удерживание попавших в организм человека токсикантов, легкодоступность для корректного отбора и исследования [13], стабильность образцов волос (они не нуждаются в специальных условиях хранения как биожидкости и могут храниться в простом бумажном конверте). Анализ волос по сегментам позволяет установить время потребления веществ по месяцам из расчета, что скорость роста волос приблизительно равна 1 см в месяц. Также к преимуществам выбора волос в качестве биообъекта для исследования можно отнести меньший процент получения ложноположительных и ложноотрицательных результатов из-за включения в процесс подготовки пробы стадии отмывки от поверхностных загрязнений [6].

С помощью современных аналитических методов в волосах можно обнаружить практически любые классы токсикантов. Главной особенностью исследования волос является правильный подбор механизма пробоподготовки для более полного извлечения аналитов из внутренней части волоса [6]. В соответствии со строением волоса и спецификой образцов волос большинство исследователей выделяют несколько стадий пробоподготовки: отмывка образцов волос, извлечение и экстракция образцов волос [2,4-8].

Идентификация веществ из экстрактов волос в основном проводится газовой хроматографией/масс-спектрометрией [1,2,4,5,6], у которой есть недостаток - потребность дериватизации полярных аналитов, к которым относятся большинство наркотических веществ. Эта проблема решена с помощью использования метода жидкостной хроматографии с традиционными детекторами или в тандеме с различными масс-спектрометрическими детекторами, например как тройной квадруполь, ионная ловушка или время-пролетная масс-спектрометрия [2,3,6,8,11].

Стадия отмывки является одной из обязательных, так как позволяет исключить факт внешнего загрязнения образца волос исследуемыми веществами. В основном для отмывки используются растворы щелочи или органические спирты, или другие растворители [2-4,7,10]. Настаивание проводить необходимо в течение 15 минут, а затем промывать дистиллированной водой.

Симонов Е.А. и др. предлагают волосы последовательно отмывать 2 мл 0,2N раствора хлористоводородной кислоты и 2 мл метанола (или этанола), по 10 минут каждым. Операция проводится до полного исчезновения в последнем растворителе, после его упаривания, следов наркотического средства [1].

Некоторые исследователи предлагают следующий вариант отмывки: волосы, разделенные на сегменты, моют шампунем и ополаскивают деионизированной водой, затем споласкивают ацетоном и просушивают в течение ночи на воздухе или при температуре 60°C [6,8].

После высушивания образцы волос режут на сегменты и помещают в пробирки для дальнейшего изолирования.

Все описываемые в литературе методы изолирования аналитов из образцов волос можно объединить в несколько вариантов [2,6]:

- 1) Щелочной гидролиз. Проводится настаивание проб волос с раствором NaOH (до 2,5M) при 37°C в течение ночи. При увеличении температуры проведения изолирования время экспозиции соответственно снижается. После этого доводят кислотой pH до 9 и проводят жидкость-жидкостную экстракцию. Данный метод изолирования используют в основном для обнаружения каннабиноидов [4,9,10,12], амфетаминов, нейролептиков и психостимуляторов [4,7]
- 2) Ферментативный гидролиз проводят с раствором глюкуронидазы в течение 2 часов при 40°C. После центрифугирования обычно проводят ТФЭ. Данный метод экстракции описан для для 6-МAM и кокаина, бензодиазепинов [4,].
- 3) Кислотный гидролиз возможно проводить несколькими методами.
  - с растворами соляной или серной кислот при 37°C в течение ночи. При увеличении температуры проведения гидролиза сокращается время экспозиции. После нейтрализации проводят ТФЭ [2] или жидкость-жидкостную экстракцию смесью растворителей [1,3]. Данный метод используется для извлечения веществ морфиновой группы, бензодиазепинов, антипсихотических средств, кокаина.
  - с метанолом [1,4], часто при использовании настаивания в ультразвуковой бане в течение нескольких часов [5,6]. Используется для обнаружения веществ группы опиатов, тетрагидроканнабинола, кокаина;
  - с метанолом, подкисленным раствором соляной кислоты. Извлечение проводится с использованием ультразвуковой бани в течение 1 часа [2], затем настаивание в течение ночи. Данный вид изолирования используется для выделения меторфана [3], амфетаминов [8,11].
  - метанол + ТФ кислота (9:1) с использованием ультразвуковой бани в течение 1 часа, затем настаивают при повышенной температуре в течение ночи. После чего проводят ТФЭ. Частный метод изолирования проводится для обнаружения 6-МAM, метадона, кокаина [2,8]

Прямое метанольное извлечение показало более высокую степень и чистоту извлечения аналитов [4,6]. При исследовании на амфетамины и другие стимуляторы показано целесообразное применение в щелочного гидролиза, так как при этом получают более полные извлечения [4]. После кислотного и щелочного гидролиза, дающего более «грязные» извле-

чения чаще всего используется ТФЭ [6]. При анализе волос на содержание каннабиноидов используется только щелочной гидролиз [4,7].

Для отдельных групп веществ, например амфетамины и другие стимуляторы, успокоительные средства, кокаин и опиаты, каннабиноиды, описано значительное количество методик анализа. Но по разработке скрининговых методик было опубликовано всего несколько работ [3]. Поэтому несомненно разработка скрининговых методик для введения в рутинную работу является наиболее перспективным направлением.

## Экспериментальная часть

**Подготовка образцов волос для анализа.** Сравнивали три варианта гидролиза волос: кислотного, щелочного и ферментного. Также сравнивали жидкостную и твердофазную экстракцию.

### Ферментный гидролиз

- Образец волос отмывали от загрязнений в химическом стакане с водным раствором ПАВ.
- Промывали деионизированной водой до полного удаления моющего средства, промыть метанолом.
- Высушивали и измельчали (ножницами).
- Взвешивали, масса навески 20-100 мг навесок волос
- Добавляли 1 мл водного раствора (рН 6.5.)  $\beta$ -глюкуронидазы 1/10.
- Выдерживали при 40° С в течение 12 часов.
- Обрабатывали на 1 час на ультразвуковой бане.
- Центрифугировали в течение 5 минут 14000 об/мин.
- Водную фазу отделяли и обрабатывали методом твердофазной экстракции.

**Кислотный гидролиз.** К навеске волос добавляли 1 мл 5М HCl. Выдерживали 45 мин при 90° С.

**Щелочной гидролиз.** К навеске волос добавляли 1 мл 1М КОН. Выдерживали 40 мин при 50° С.

### Жидкостная экстракция

- В пробирку объемом 10 мл вносят 3 г хлорида натрия, твердый буфер на кончике шпателя 40-50 мг и 3 мл экстракционной смеси.
- В пробирку с экстракционной смесью вносят 1 мл гидролизата волос.
- Добавляют 30 мкл внутреннего стандарта дифениламина (раствор «Б» концентрацией 20 мкг/мл), концентрация ВС в пробе 200 нг/мл.
- Экстрагируют 10 мин на орбитальном шейкере
- Центрифугируют при 3000 об/мин 5 мин.
- Отделяют органический слой, переносят его в пробирку объемом 4 мл или в металлический колпачок TOX-LAB для упаривания и упаривают в токе горячего воздуха. (К сухому остатку добавляют 70 мкл этилацетата, встряхивают на вибромиксере 2-3 сек, 1 мкл пробы вводят в хроматограф.

### Твердофазная экстракция

- Кондиционирование картриджа (колонки) (поток 3-5 мл/мин).
  - 3 мл метанола.
  - 3 мл 0,1 М фосфатного буфера, рН 6.0.
- Нанесение образца на колонку.

- Пропускали пробу через колонку.
- Промывка водой.
  - Пропускали через колонку 3 мл деионизованной воды (поток 3-5 мл/мин).
- Подкисление.
  - Пропускали 2 мл 1М уксусной кислоты через колонку (поток 3-5 мл/мин).
  - Высушивали колонку в течение 2 минут.
- Промывка гексаном.
  - Пропускали через колонку 3 мл гексана (поток 3-5 мл/мин).
- Сбор кислой/нейтральной фракции.
  - Пропускали через колонку 1,7 мл смеси гексан:этилацетат (1:1) (поток 1-2 мл/мин).
  - Собирали кислую/нейтральную фракцию.
  - Удаляли остатки элюента током азота.
- Промывка колонки метанолом.
  - Пропустить через колонки 3 мл метанола (поток 3-5 мл/мин).
  - Высушить колонку в течение 2 минут.
- Сбор основной фракции.
  - Пропустить через колонки 1,7 мл смеси дихлорметан : пропанол-2 : концентрированный раствор аммиака (78:20:2) (поток 1-2 мл/мин).
  - Собрать основную фракцию.
- Концентрирование фракций.
  - Упарить содержимое виал с собранными фракциями.
  - Перерастворить остаток в 100  $\mu$ л этилацетата.
  -

Аппаратура ГХ-МС. Скрининговый анализ выполняли на хроматографе с масс-селективным детектором Agilent 7820/5975 Маэстро с колонками HP-5MS.

Условия анализа: газ-носитель гелий, скорость потока через колонку 2 мл/мин. Программа: 50<sup>0</sup>С(0.5мин) 99<sup>0</sup>С /мин 100<sup>0</sup>С (1мин) 15<sup>0</sup>С/мин 280 <sup>0</sup>С (30 мин) время удерживания ВС ДФА 9.27 мин.

Условия масс-спектрометрического детектирования:

Анализ в режиме сканирования по полному ионному току (SCAN)

Температура источника ионов 230<sup>0</sup>С

Температура анализатора 150<sup>0</sup>С

Диапазон масс m/z 29-650 а. е. м.

Напряжение на умножителе: результат, полученный при автоматической настройке по перфторбутиламину в режиме ATUNE + 100 кВ.

Идентификацию веществ выполняли веществ в режиме автоматической AMDIS идентификации по фиксированным временам удерживания [14-16].

**Аппаратура ВЭЖХ-МС/МС.** Жидкостный хроматограф Agilent 1200 с тандемным масс-спектрометрическим детектором Agilent 6460 с электроспреей ионизацией

**Условия ВЭЖХ анализа [17].** Колонка: Prontosil C<sub>18</sub> 75 мм 2.1 мм 5 мкм

Элюенты: А- ацетат аммония водный (0.15 г на 100 мл), с добавлением 50 мкл муравьиной кислоты). В - метанол

Условия элюирования: 5%B300 мл, 90%B1025 мл, 90%B1600 мл, 100%B1610 мл 100%B2400 мл.

Объем вводимой пробы 10 мкл.

### Результаты и их обсуждение

Целью исследования было - оптимизировать методы подготовки и твердофазной очистки малых навесок проб волос. Анализировали волосы от трупа и от живых лиц.

Целевые вещества: новые синтетические стимуляторы, известные наркотические и лекарственные препараты.

**Выбор и обоснование методов гидролиза.** Сравнивали кислотный щелочной и ферментный гидролиз. Условия представлены в разделе экспериментальная часть. Для анализа использовали три навески волос по 100 мг, полученные от одного образца. Волосы были отобраны от трупа и, как показал предварительный анализ, содержали трамадол и его метаболиты.

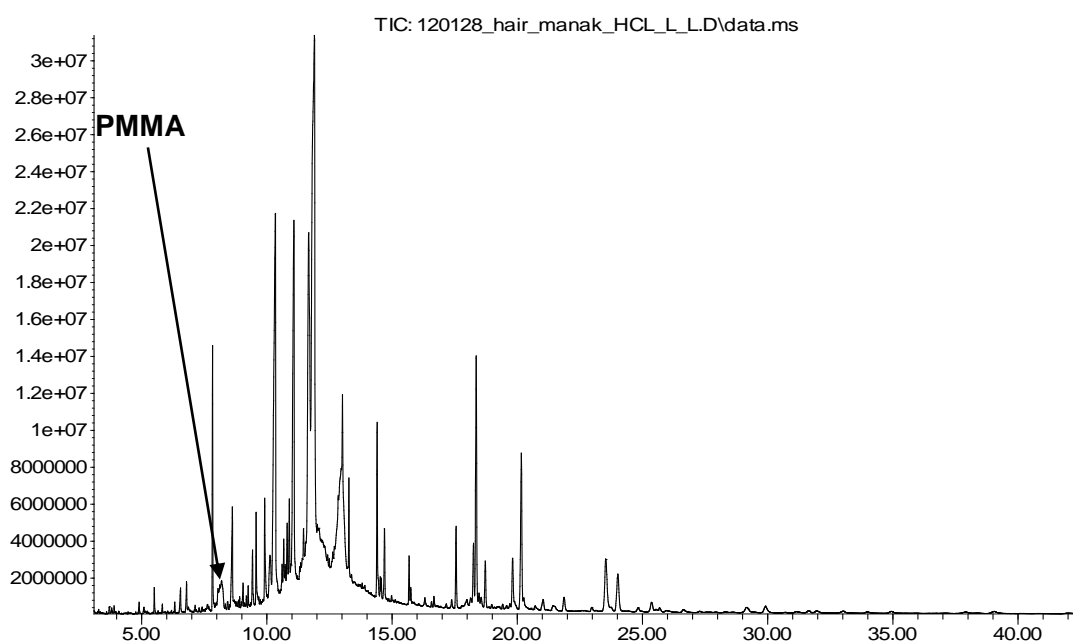
Также проводили оптимизацию методики ферментного гидролиза. Исследовали влияние различных значений pH: 4.0, 6.5 и 7.5 на эффективность гидролиза.

Полученные гидролизаты волос подвергали твердофазной очистке.

Результаты ГХ-МС анализа показали, что ферментный гидролиз наиболее эффективен при всех трех значениях pH. При кислотном гидролизе наблюдали значительные до 70% потери трамадола, при щелочном гидролизе трамадол в исследуемых волосах обнаружен не был.

**Влияние твердофазной очистки на чувствительность определения.** Сравнивали результаты анализа навесок (100 мг) волос, отобранных от трупов и содержащих параметоксиметамфетамин. Навески подвергали кислотному гидролизу с последующей жидкостной или твердофазной экстракцией. Результаты ГХ-МС анализа показали, что применение твердофазной экстракции позволяет на порядок величины поднять чувствительность определения. Наиболее эффективно совмещать твердофазную экстракцию с предварительным ферментным гидролизом. ГХ-МС профили (в режиме полного сканирования) экстрактов гидролизатов волос даны на рис. 1 и 2.

Abundance



Time-->



Рис.1. p-Метоксиметамфетамин в волосах трупа, кислотный гидролиз (5M HCL), жидкостная экстракция смесью растворителей метиленхлорид-гептан-изопропанол 7:2:1. (100 мг волос)

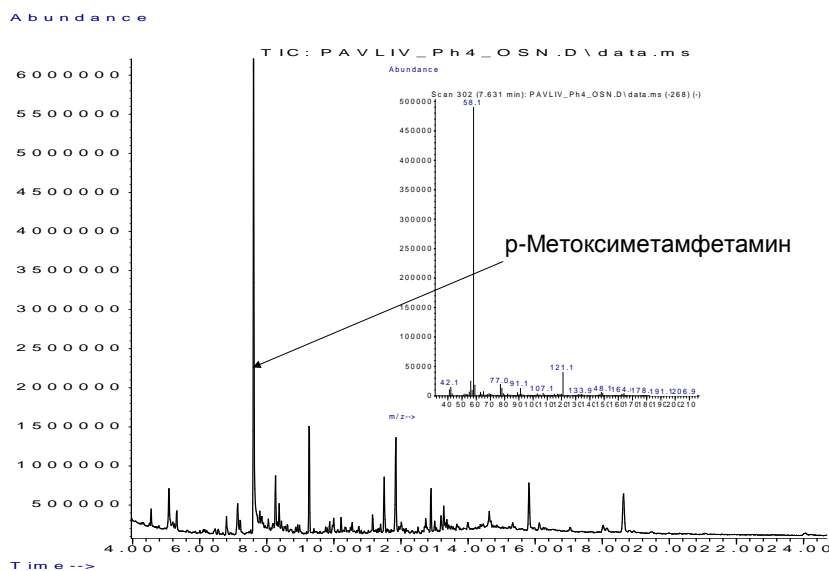


Рис. 2. Хроматограмма по полному ионному току экстракта гидролизованных волос трупа p-Метоксиметамфетамин в волосах трупа, ферментный гидролиз pH 4, SPE Bond Elute Certify (100 мг волос)

### Выбор и сравнение картриджей твердофазной очистки для ГХ-МС анализа волос.

Сравнивали два типа патронов для твердофазной экстракции Bond Elute Certify и AccuBond II SPE Evidex. Исследовали навески по 50 мг волос, содержащие различные наркотические и лекарственные препараты. Для подготовки образцов использовали ферментный гидролиз. Полученные результаты позволяют говорить о сравнимой эффективности твердофазной очистки при использовании обоих картриджей. Однако, при определении метадона мы столкнулись с проблемой, которая заключалась в следующем. При использовании картриджей Bond Elute Certify на ГХ-МС хроматограмме наблюдали элюирование незначительного количества фоновых углеводов. Пик одного из гомологов этих фоновых веществ накладывался на пик метадона и препятствовал его определению. Это происходило из-за того, что масс-спектр фонового вещества содержал значительный фрагментный ион  $m/z$  72, а этот ион является целевым ионом метадона. При этом в масс-спектре метадона отсутствуют другие ионы пригодные для детектирования. В исследуемом случае метадон удалось определить

при сравнении профилей волос содержащих и не содержащих метадон. Однако масс-спектр метадона в этих образцах удалось зафиксировать только в случае использования картриджей AccuBond II SPE Evidex. Профили и масс-спектры представлены на рис. 3. Применение ВЭЖХ-МС/МС позволяет уверенно определять метадон при использовании обоих картриджей. Профиль экстракта волос, содержащих метадон представлен на рис.4.

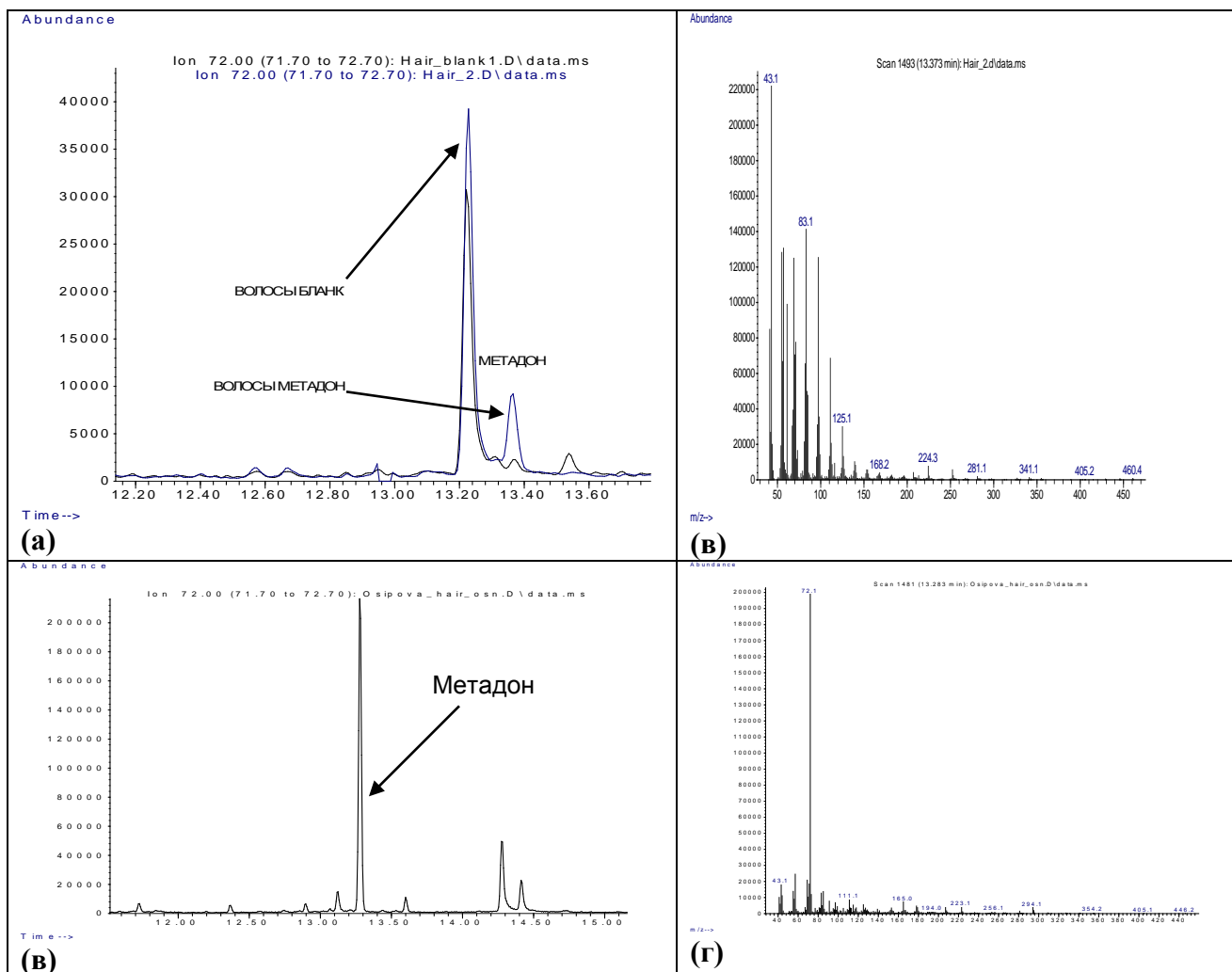


Рис 3(а). Наложение ГХ-МС профилей (по  $m/z$  72) образцов волос, содержащих и не содержащих метадон. Ферментный гидролиз, картридж Bond Elute Sertify.

Рис 3(б). Наложение масс-спектров метадона и фонового вещества, картридж Bond Elute Ser-tify.

Рис 3(в). ГХ-МС профиль (по m/z 72) образца волос, содержащего метадон. Ферментный гидролиз, картридж AccuBond II SPE Evidex.

Рис 3(г). Масс-спектр метадона, зафиксированный в образце волос, картридж Bond Elute Ser-tify.



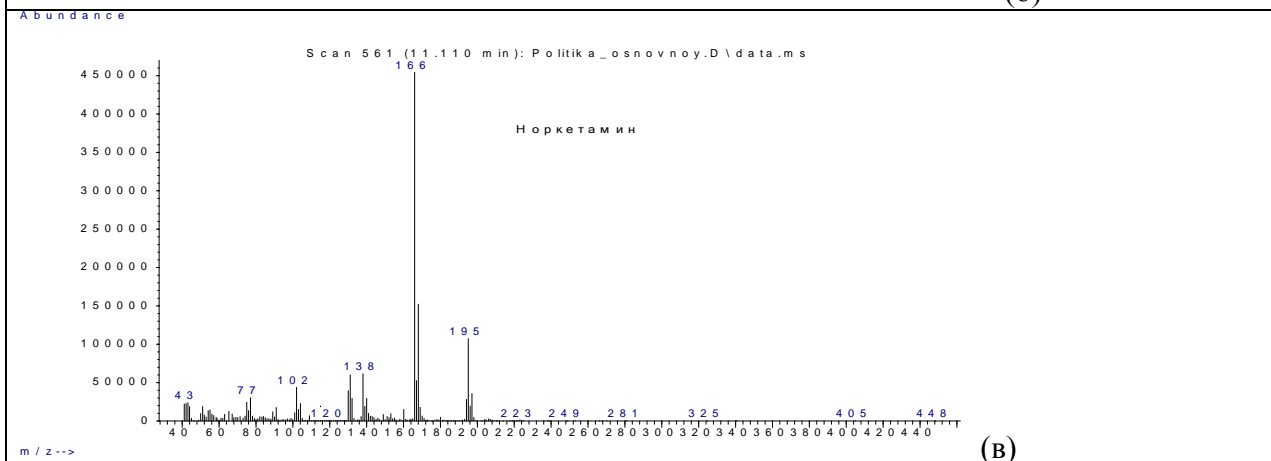
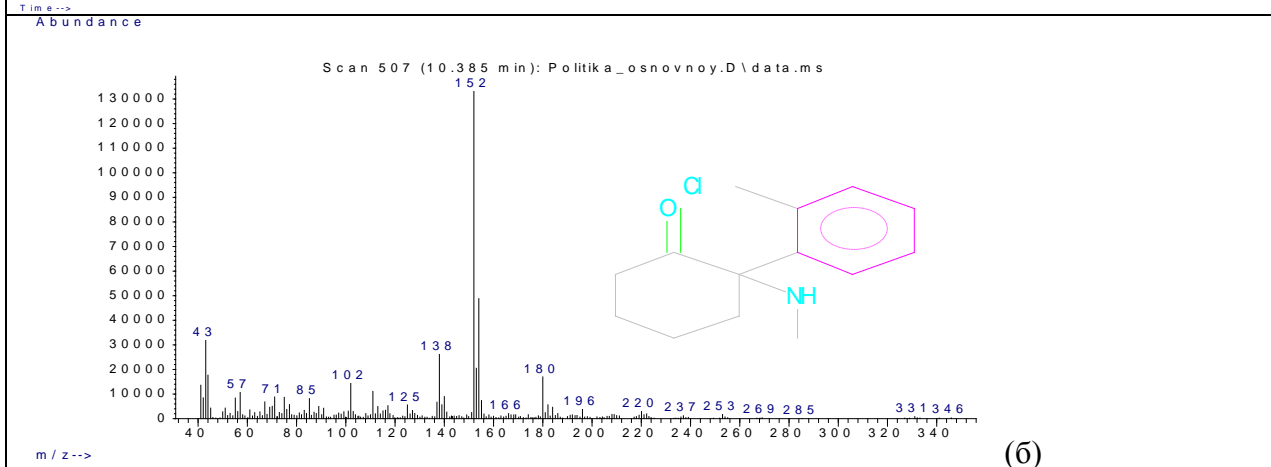
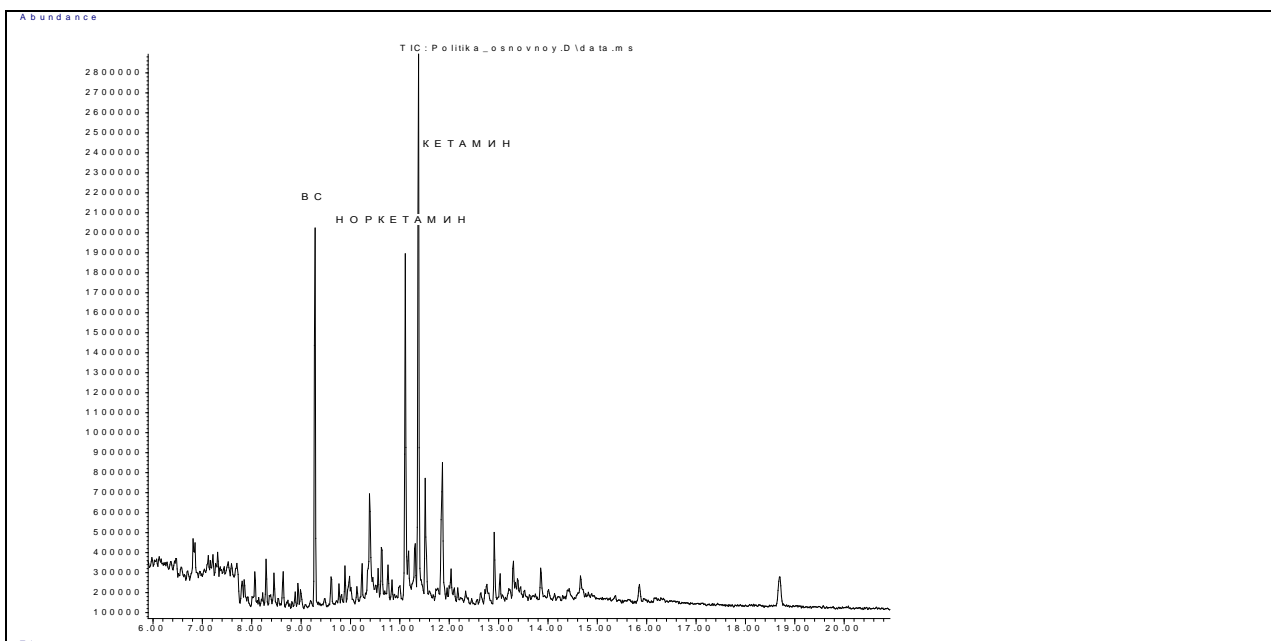
Рис 4. ВЭЖХ-МС/МС профиль (MRM 310/265) образца волос, содержащего метадон. Ферментный гидролиз, картридж AccuBond II SPE Evidex.

Рис 3(г). Масс-спектр метадона, зафиксированный в образце волос, картридж Bond Elute Ser-tify.

#### **Анализ малых навесок волос**

Исследовали возможность анализа малых навесок волос. Анализировали 20, 50 и 100 мг пробы. Полученные результаты позволяют сделать следующий вывод. Возможно анализировать без потери чувствительности малые навески волос (20 мг) при этом объем финального экстракта, поступающего на анализ, должен быть уменьшен и составлять 25-30 мкл.

На рис. 5 и 6 даны ГХ-МС профили экстракта волос, масса навески 20 мг. В исследуемом образце обнаружены: кетамин с метаболитами и кокаин с метаболитом (ангидроэргонина метиловым эфиром), а также никотин и кофеин..



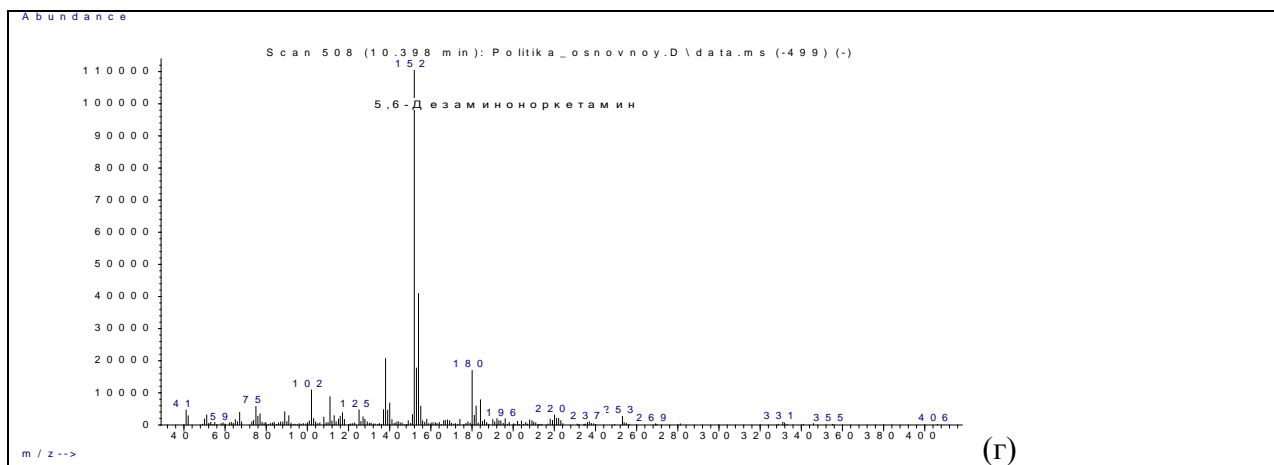
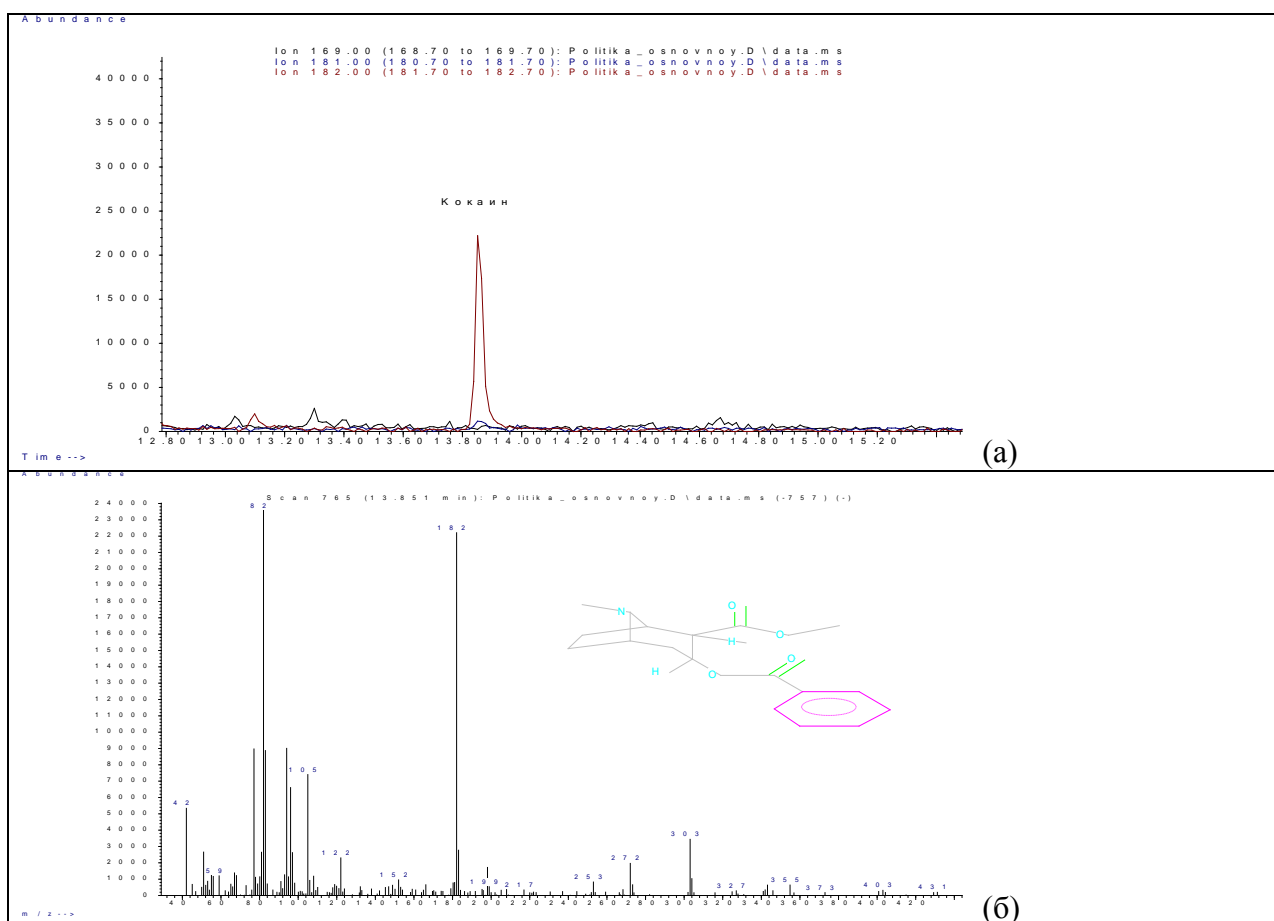


Рис. 5.(а) - Хроматограмма исследуемой пробы (SCAN) по экстрагированным ионам, соответствующим внутреннему стандарту, кетамину и его метаболитам. Вещества идентифицированы по временам удерживания и по масс-спектрам. Пик с временем удерживания 11.37 мин соответствует кетамину, 11.10 мин – норкетамину, 10.39 мин – 5,6-дезаминоркетамину, 9.28 – дифениламин, внутренний стандарт. Масс-спектры представлены на рис. 5 (б-г), соответственно.



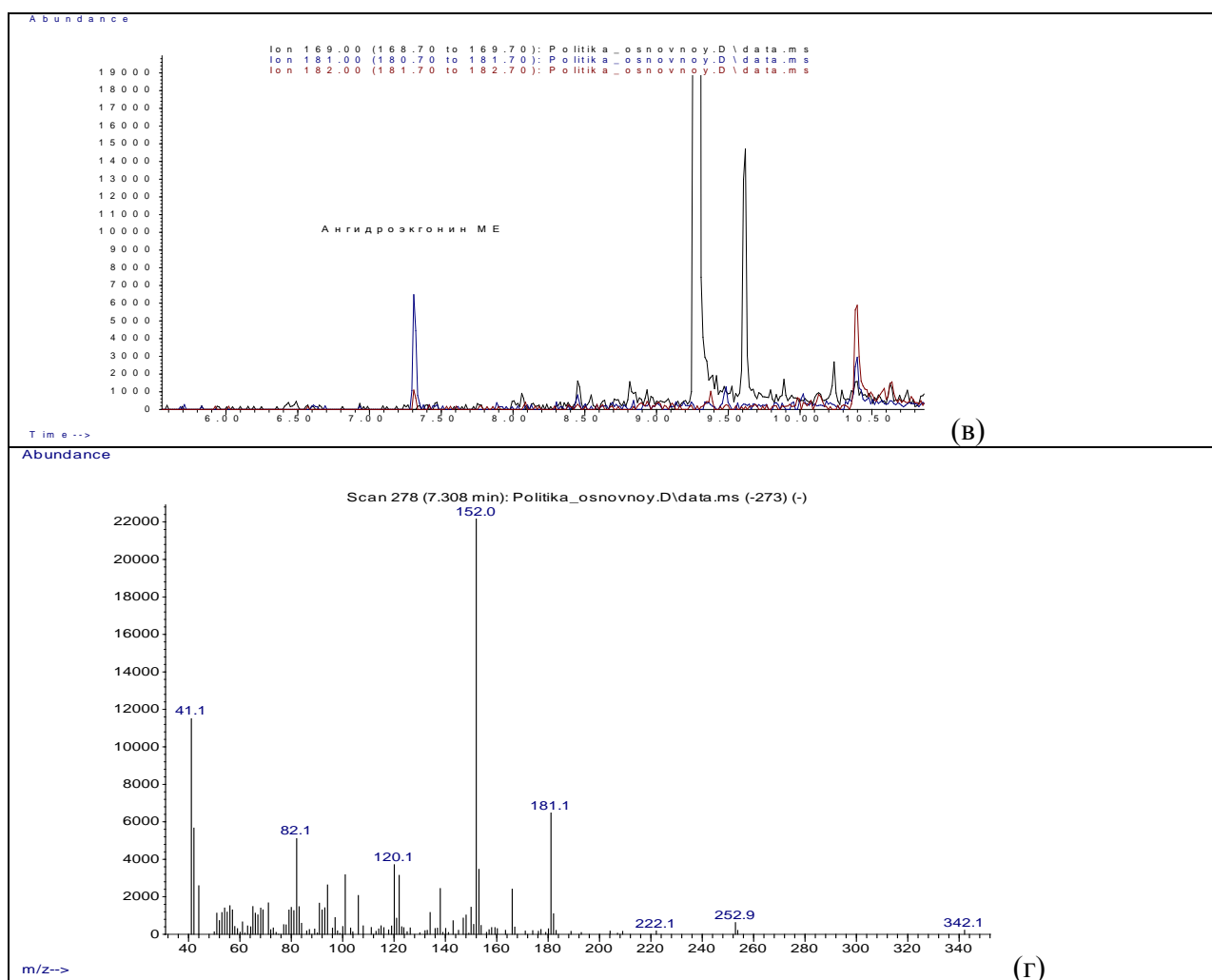


Рис. 6. - Хроматограмма исследуемой пробы (SCAN) по экстрагированным ионам, соответствующим кокаину и метиловому эфиру ангидробензоилэкогонина. Вещества идентифицированы по временам удерживания и по масс-спектрам. Пик с временем удерживания 13.85 мин соответствует кокаину, 7.31 мин – метиловому эфиру ангидробензоилэкогонина. Масс-спектры представлены на рис. 6 (б,г), соответственно.

### Список литературы

- 1) Е.А. Симонов, Б.Н. Изотов, А.В. Фесенко «Наркотики: методы анализа на коже, в её придатках и выделениях» М.: «Анахарсис», 2000.—130 с.
- 2) Yuji Nakahara «Hair analysis for abused and therapeutic drugs» - **Journal of Chromatography B**, **733 (1999) 161–180**
- 3) Yvan Gaillard, Gilbert Pe'pin «Testing hair for pharmaceuticals» - **Journal of Chromatography B**, **733 (1999) 231–246**
- 4) Hans Sachsa, Pascal Kintz «Testing for drugs in hair. Critical review of chromatographic procedures since 1992» - **Journal of Chromatography B**, **713 (1998) 147–161**
- 5) Katrin Lachenmeier, Frank Musshoff, Burkhard Madea «Determination of opiates and cocaine in hair using automated enzyme immunoassay screening methodologies followed by gas chromatographic–mass spectrometric (GC–MS) confirmation» - *Forensic Science International* **159 (2006) 189–199**
- 6) Juan C. Domínguez-Romero, Juan F. García-Reyes, Antonio Molina-Díaz «Screening and quantitation of multiclass drugs of abuse and pharmaceuticals in hair by fast liquid chroma-

- tography electrospray time-of-flight mass spectrometry» - Journal of Chromatography B, 879 (2011) 2034–2042
- 7) Elissandro Soares Emídio, Vanessa de Menezes Prata, Fernando José Malagueño de Santanab, Haroldo Silveira Dórea «Hollow fiber-based liquid phase microextraction with factorial design optimization and gas chromatography–tandem mass spectrometry for determination of cannabinoids in human hair» - Journal of Chromatography B, 878 (2010) 2175–2183
  - 8) Donata Favretto, Susanna Vogliardi, Giulia Stoccherob, Alessandro Nallessa, Marianna Tuccia, Santo Davide Ferrara «High performance liquid chromatography–high resolution mass spectrometry and micropulverized extraction for the quantification of amphetamines, cocaine, opioids, benzodiazepines, antidepressants and hallucinogens in 2.5 mg hair samples» - Journal of Chromatography A, 1218 (2011) 6583–6595
  - 9) Analytical methods for abused drugs in hair and their applications
  - 10) Elissandro Soares Emídio, Vanessa de Menezes Prata, Haroldo Silveira Dyrea «Validation of an analytical method for analysis of cannabinoids in hair by headspace solid-phase microextraction and gas chromatography–ion trap tandem mass spectrometry» - Analytica Chimica Acta 670 (2010) 63–71
  - 11) «Development of a simultaneous analytical method for selected anorectics, methamphetamine, MDMA, and their metabolites in hair using LC-MS/MS to prove anorectics abuse» - Anal Bioanal Chem (2012) 403:1385–1394
  - 12) «Segmental Hair Analysis for 11-Nor-D9-Tetrahydrocannabinol-9-Carboxylic Acid and the Patterns of Cannabis Use» - Journal of Analytical Toxicology 2012;36:195–200
  - 13) Токсикологическая химия. Метаболизм и анализ токсикантов: учебное пособие (под ред. Н.И. Калетиной) – М.: ГЭОТАР-Медиа, 2008. – 1016 с. с ил.
  - 14) Савчук С.А. Система удаленной идентификации и распознавания объектов сложного состава Патент на изобретение (19)RU(11) 77474 (13) (51) МПК G06K 17/00 (2006.01). Дата начала срока действия патента 15.07.2008. Опубликовано 20.10.2008 Бюл. №29.
  - 15) С.А.Савчук, А.Н.Веденин Применение программы фиксации времен удерживания при хромато-масс-спектрометрическом определении анализируемых веществ Российский химический журнал (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева), 2003, т. XLVII, №1, с. 141.
  - 16) С.А.Савчук, Е.А.Симонов, В.И.Сорокин, О.Б.Дорогокупец, А.Н.Веденин. Применение метода фиксации времен удерживания при хромато-масс-спектрометрическом и хроматографическом определении наркотических средств Журнал Аналитической Химии, 2004, Т. 59, №10, с. 1059-1069.
  - 17) Andrej Grigoryev, Sergey Savchuk, Aleksandra Melnik, Natal'ja Moskaleva, Jurij Dzhurko, Mihail Ershov, Aleksandr Nosyrev, Aleksandr Vedenin, Boris Izotov, Irina Zabirowa, Vladimir Rozhanets. Chromatography–mass spectrometry studies on the metabolism of synthetic cannabinoids JWH-018 and JWH-073, psychoactive components of smoking mixtures. Journal of Chromatography B, 879 (2011) 1126–1136

## Приложение 6.

### Сводная библиотека масс-спектров SUDMED\_1465

адрес постоянного размещения пакета <http://www.sudmed.ru/index.php?showtopic=6924>

Состав пакета:

- SUDMED\_1465\_NISTLIB\_20141026* - библиотека в формате NIST Search  
*SUDMED\_1465\_AMDISLIB\_20141026* - библиотека в формате AMDIS  
*SUDMED\_1465\_ACSLIB\_20141026* - библиотека в формате хемстанции (Agilent ChemStation)  
*SUDMED\_1465\_20141026.pdf* - список содержимого библиотеки

Сводная библиотека включает спектры метаболитов преимущественно в виде триметилсилильных и метильных дериватов, включает многие рабочие структуры и линейные индексы удерживания. В сводную библиотеку вошли спектры опубликованные для свободного использования в открытых источниках, в том числе в библиотеках CAYMANSPECTRALLIBRARY, SWGDRUG, rf-des\_drug, pub\_cann, на интернет ресурсе sudmed.ru, в научных публикациях.

1.	JWH-250 -M1		alkyl-OH), methyl-, acetyl-		pyrrolidinylmethane ME
2.	JWH-250 -M2 AC	31.	LTI-258 (APINACA)	68.	Diphenyl-2-
3.	JWH-250 -M6 2AC	32.	ABCM(N)-2201		pyrrolidinylmethane TFA
4.	JWH-250 -M7 2AC	33.	ACBM-018 (APICA)	69.	Nalidixinic Acid, TMS
5.	JWH-250 -M2 TMS	34.	ACBM-2201	70.	Nalidixic acid, methyl ether
6.	JWH-250 -M6 2TMS	35.	A-836,339		
7.	JWH-250 -M7 2TMS	36.	25I-NBOMe	71.	Nalidixic acid, PFPyl ether
8.	JWH-250 -M1 TFA	37.	25I-NBOMe imine	72.	Scopolamine
9.	JWH-250 -M/artifact	38.	Carfentanyl	73.	Scopolamine, -H2O
10.	TMS Ether 1-pentyl-1H-indole-3-carboxylic acid	39.	CP47,497-C8 homolog	74.	Scopolamine, acetyl-Sibutramine
11.	quinolin-8-ol TMS Ether	40.	JWH-018	75.	Sibutramine
12.	artefact I base hydr PB-22 (TMS)	41.	JWH-073	76.	Tramadol acetyl-
13.	Artefact II base Hydr PB-22 (TMS)	42.	CP47,497-C8 homolog, diacetyl-	77.	Zopiclone
14.	Acid Hydr PB-22 Artefact I (TMS)	43.	CP47,497-C8 homolog, di-TMS-	78.	Zopiclone artifact
15.	2-(Diphenylmethyl)pyrrolidine, N-acetyl-	44.	CP-47,497-C8 isomer, diacetyl-	79.	Zopiclone hydr acetyl-
16.	2-(Diphenylmethyl)pyrrolidine	45.	CP-47,497-C8 isomer, diPFP-	80.	Zopiclone hydr, methyl-
17.	5-APB	46.	CP-47,497-C8 isomer, diTFA-	81.	Zopiclone, hydr, TMS
18.	5-APB, Ac	47.	CP-47,497-C8, di-TMS-	82.	Zopiclone, hydr
19.	6-APB	48.	CP-47,497-C8, diacetyl-	83.	Zopiclone, hydr, methyl-
20.	6-APB, Ac	49.	CP-47,497-C8, diPFP-	84.	Zopiclone, hydr, PFP-
21.	Methoxetamine	50.	CP-47,497-C8, diTFA-	85.	Zopiclone, hydr, ethyl-
22.	Methoxetamine, N-acetyl-	51.	CP47,497-C8	86.	Zopiclone, hydr, PFBz-
23.	AB-PINACA-M2 (COOH, oxo=), methyl-	52.	CP47,497-C8 isomer	87.	Zopiclone, hydr, PFBz-
24.	AB-PINACA-M2 (COOH, oxo=), TMS	53.	CP-47,497-C8 isomer, methyl-	88.	2-amino-5-chloropyridine
25.	AB-PINACA-M3 (COOH, -OH), methyl-	54.	CP-47,497-C8, methyl-	89.	2-amino-5-chloropyridine acetyl-
26.	AB-PINACA-M3 (COOH, Alkyl-OH) methyl-, TMS	55.	ACBM(N)-2201	90.	Ketorolac Artefact
27.	AB-PINACA-M3 (COOH, alkyl-OH), diTMS	56.	STS-135	91.	JWH-018
28.	AB-PINACA-M4 (COOH, Aryl-OH), dimethyl-	57.	LTI-258 (APINACA)	92.	JWH-018
29.	AB-PINACA-M4 (COOH, Aryl-OH), diTMS	58.	Desomorphine, acetyl-	93.	JWH-073
30.	AB-PINACA-M3 (COOH,	59.	Desomorphine	94.	Methamphetamine
		60.	Desomorphine, methyl-	95.	para-methylephedrone
		61.	Desomorphine, butyrate-		\$\$\$ 2-(methylamino)-1-(4-methylphenyl)propan-1-one
		62.	Desomorphine, TMS		(1RS,3SR)-3-[4-(1,1-dimethyloctyl)-2-hydroxyphenyl]cyclohexan-1-ol \$\$\$ CP-47,497-C8
		63.	Desomorphine, Propionyl-	97.	JWH-073
		64.	Desomorphine, PFP-	98.	(1RS,3SR)-3-[4-(1,1-dimethylheptyl)-2-hydroxyphenyl]cyclohexan-1-ol \$\$\$ CP-47,497-C7
		65.	Desomorphine, pentafluorbenzyl-		\$\$\$ CP-47,4
		66.	Desomorphine, TFA-		
		67.	Diphenyl-2-		



<b>99.</b>	Fluoromethcathinone \$\$\$ 1-(fluorophenyl)-2-(methylamino)propan-1-one	<b>117.</b>	Methylone \$\$\$ 2-methylamino-1-(3,4-methylenedioxyphenyl)propan-1-one	<b>146.</b>	mCPP, TMS
<b>100.</b>	Fluoromethcathinone \$\$\$ 1-(fluorophenyl)-2-(methylamino)propan-1-one	<b>118.</b>	5-MeO-DALT \$\$\$ N,N-diallyl-5-methoxytryptamine	<b>147.</b>	Piperonylpiperazine
<b>101.</b>	para-methylephedrone \$\$\$ 2-(methylamino)-1-(4-methylphenyl)propan-1-one	<b>119.</b>	5-MeO-DALT \$\$\$ N,N-diallyl-5-methoxytryptamine	<b>148.</b>	Bupropion
<b>102.</b>	3,4-Methylenedioxypropylvalerone \$\$\$ MDPV \$\$\$ 1-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-2-(1-pyrrolidinyl)-1-pen	<b>120.</b>	AM-694 \$\$\$ (1-(5-fluoropentyl)-1H-indol-3-yl)(2-iodophenyl)methanone	<b>149.</b>	2-Bromo-2,5-dimethoxybenzylpiperazine
<b>103.</b>	3,4-Methylenedioxypropylvalerone \$\$\$ MDPV \$\$\$ 1-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-2-(1-pyrrolidinyl)-1-pen	<b>121.</b>	JWH-081 \$\$\$ 1-Pentyl-3-(4-methoxy-1-naphthoyl)indole	<b>150.</b>	2-Bromo-2,5-dimethoxybenzylpiperazine, acetyl-
<b>104.</b>	Aprofene \$\$\$ Propionic acid, 2,2-diphenyl-, 2-(diethylamino)ethyl ester	<b>122.</b>	JWH-122 \$\$\$ 1-Pentyl-3-(4-methyl-1-naphthoyl)indole	<b>151.</b>	JWH 018 -M1 (HO-) TMS
<b>105.</b>	105 (4-methoxyphenyl)(1-pentyl-1H-indol-3-yl)methanone	<b>123.</b>	2C-E \$\$\$ 4-Ethyl-2,5-Dimethoxyphenethylamine	<b>152.</b>	JWH 018 -M4 (HO-) TMS
<b>106.</b>	Ethcathinone \$\$\$ 2-(ethylamino)-1-phenylpropan-1-one \$\$\$ N-ethylcathinone	<b>124.</b>	para-methylethcathinone \$\$\$ 2-(ethylamino)-1-(4-methylphenyl)propan-1-one	<b>153.</b>	JWH 018 -M5 (-COOH) TMS
<b>107.</b>	Ethcathinone \$\$\$ 2-(ethylamino)-1-phenylpropan-1-one \$\$\$ N-ethylcathinone	<b>125.</b>	para-methylethcathinone \$\$\$ 2-(ethylamino)-1-(4-methylphenyl)propan-1-one	<b>154.</b>	JWH 018 -M7 2(HO-) 2TMS
<b>108.</b>	JWH-250 \$\$\$ 1-pentyl-3-(2-methoxyphenylacetyl)indole	<b>126.</b>	Butylone \$\$\$ 2-methylamino-1-(3,4-methylenedioxyphenyl)butan-1-one	<b>155.</b>	JWH 018 -M8 2(HO-) 2TMS
<b>109.</b>	JWH-250 \$\$\$ 1-pentyl-3-(2-methoxyphenylacetyl)indole	<b>127.</b>	para-methylamphetamine	<b>156.</b>	JWH 073 -M1 (HO-) TMS
<b>110.</b>	JWH-251 \$\$\$ 1-pentyl-3-(2-methylphenylacetyl)indole	<b>128.</b>	para-fluoroamphetamine	<b>157.</b>	AB-FUBINACA M1, TMS
<b>111.</b>	JWH-251 \$\$\$ 1-pentyl-3-(2-methylphenylacetyl)indole	<b>129.</b>	Salvinorin \$\$\$ Divinorin A	<b>158.</b>	BB-22 marker, methyl-
<b>112.</b>	(1-naphthyl)(1H-indol-3-yl)methanone \$\$\$ 3-(1-naphthoyl)indole	<b>130.</b>	JWH-210 \$\$\$ 1-Pentyl-3-(4-ethyl-1-naphthoyl)indole	<b>159.</b>	PB-22 marker, Ethyl-
<b>113.</b>	(1-naphthyl)(1H-indol-3-yl)methanone \$\$\$ 3-(1-naphthoyl)indole	<b>131.</b>	2C-B-FLY	<b>160.</b>	PB-22 marker, methyl-
<b>114.</b>	Naphyrone \$\$\$ 1-(naphthalen-2-yl)-2-(pyrrolidin-1-yl)pentan-1-one	<b>132.</b>	3C-B-FLY	<b>161.</b>	PB-22F marker, TMS
<b>115.</b>	Naphyrone \$\$\$ 1-(naphthalen-2-yl)-2-(pyrrolidin-1-yl)pentan-1-one	<b>133.</b>	Bromo-DragonFLY	<b>162.</b>	PB-22F marker, methyl-
<b>116.</b>	Methylone \$\$\$ 2-methylamino-1-(3,4-	<b>134.</b>	Dimethylcathinone	<b>163.</b>	PB-22F marker, TMS
		<b>135.</b>	Ethylcathinone	<b>164.</b>	5-Fluoro AB-PINACA M1 (marker), methyl-
		<b>136.</b>	Ethylcathinone, Ac	<b>165.</b>	5-Fluoro AB-PINACA M1, bisTMS-
		<b>137.</b>	2,4,5-Trimethoxyamphetamine	<b>166.</b>	5-Fluoro AB-PINACA M1, TMS
		<b>138.</b>	2,4,6-Trimethoxyamphetamine	<b>167.</b>	AB-CHMINACA M1 (marker), methyl-
		<b>139.</b>	3,4,5-Trimethoxyamphetamine	<b>168.</b>	AB-CHMINACA, TMS-
		<b>140.</b>	2,4,5-Trimethoxyamphetamine, TFA	<b>169.</b>	AB-CHMINACA, bis-TMS-
		<b>141.</b>	2,4,6-Trimethoxyamphetamine, TFA	<b>170.</b>	AB-FUBINACA M1 methyl- (marker AB-FUBINACA)
		<b>142.</b>	3,4,5-Trimethoxyamphetamine, TFA	<b>171.</b>	MDPV
		<b>143.</b>	4-Methoxypiperazine	<b>172.</b>	MDPV-M (3,4-dihydroxyphenyl-), dimethyl-
		<b>144.</b>	Benzylpiperazine	<b>173.</b>	MDPV-M (4-HO-,3-MeO-), acetyl-
		<b>145.</b>	Benzylpiperazine, TMS	<b>174.</b>	MDPV-M (4-HO-,3-MeO-)
				<b>175.</b>	MDPV-M (acycl), dimethyl-
				<b>176.</b>	MDPV-M (acycl, 3,4-dihydroxyphenyl-), tetramethyl-
				<b>177.</b>	MDPV-M (3,4-dihydroxyphenyl-), diacetyl-
				<b>178.</b>	MDPV-M (oxo=, 3,4-dihydroxyphenyl-), diacetyl-
				<b>179.</b>	MDPV-M (oxo=, 3,4-dihydroxyphenyl-), dimethyl-
				<b>180.</b>	MDPV-M, (oxo=)
				<b>181.</b>	MDPV-M (oxo=, 4-HO-, 3-MeO-), acetyl-
				<b>182.</b>	Mephedrone -M (HO-) 2Ac
				<b>183.</b>	Mephedrone -M (Mephedrine) 2Ac
				<b>184.</b>	Mephedrone -M (normephedrine-) 2 Ac isomer1
				<b>185.</b>	Mephedrone -M

	(normephedrine-) 2Ac isomer 2		
186.	Mephedrone ME	250.	DIPT
187.	Methedrone TFA	251.	DPT
188.	Methedrone TFA	252.	5-MeO-DET
189.	Methedrone ME	253.	5-MeO-MIPT
190.	Methedrone AC	254.	4-OH-DIPT
191.	Methedrone AC	255.	5-MeO-DPT
192.	Methedrone AC	256.	4-AcO-DIPT
193.	Methedrone	257.	N
194.	Methedrone		(Cyclopropylmethyl)mephe
195.	Methedrone		drone\$\$\$N,N
196.	Methedrone		Cyclopropylmethyl methyl
197.	Methedrone		1 (4 methylphenyl) 2
198.	Methedrone	258.	aminopropan
199.	Methedrone		N Allylmephedrone\$\$\$N
200.	4-MeO-PCP		Allyl 4
201.	Psilocin, diTMS-	259.	methylmethcathinone
202.	4-FMC (IT-MS)		Butylone ME\$\$\$N
203.	MDPV (IT-MS)		Methylbutylone, bk
204.	MDPBP (IT-MS)		MMBDB
205.	Pentylone (IT-MS)	260.	N-
206.	MPPP (IT-MS)		(Methylcyclopropyl)butylon
207.	HU-210 2TMS		e
208.	HU-331	261.	N Allylbutylone
209.	CB-25	262.	Methylone ET
210.	CB-52	263.	N
211.	HU-210		(Cyclopropylmethyl)methyl
212.	HU-211		one
213.	CP 47,497 C7	264.	N Allylmethylone\$\$\$2 (N,N
214.	CP 55, 940		Allyl methylamino) 1 (3,4
215.	L-759, 633		methylenedioxyphenyl)pro
216.	BAY 59-3074		pan 1 one
217.	Oleamide	265.	N-ethylmethylone
218.	WIN 55212-2	266.	N-allylbutylone
219.	JWH-200	267.	N
220.	JWH-133		(Methylcyclopropyl)butylon
221.	JWH-015		e
222.	JWH-020	268.	TMA-2
223.	JWH-072	269.	TMA-2
224.	JWH-019	270.	TMA
225.	DEA	271.	2C-B
226.	Salvinorin A	272.	2CT-2
227.	DD-001	273.	2CT-7
228.	JWH-210-tomsk	274.	desmethylpyrovaleron
229.	4-FMP	275.	Benzylpiperazine
230.	4-FMP	276.	Benzylpiperazine
231.	Indan-2-amine	277.	Memantine
232.	PMMA	278.	Memantine
233.	MBZP	279.	Desmethylvenlafaxine, O-
234.	BDB	280.	Desmethylvenlafaxine, O-
235.	HMDMA-2	281.	Dehydronorketamine
236.	MMDA-2	282.	Dehydronorketamine
237.	2C-E	283.	
238.	2C-C		Trifluoromethylphenylpiper
239.	4-mpp		azine, 3- # TFMPP
240.	bk-MDEA	284.	
241.	TMA-6		Trifluoromethylphenylpiper
242.	MDBP		azine, 3- # TFMPP
243.	2C-I	285.	Benzylpiperazine, N- #
244.	DOI		BZP
245.	2C-T2	286.	Methylenedioxyphenyl-2-
246.	MIPT		butanamine, -3,4- # BDB
247.	2C-T4	287.	Methylenedioxyphenyl-2-
248.	5-MeO-AMT		butanamine, -3,4- # BDB
249.	5-MeO-DMT	288.	BDB Formyl artifact
		289.	Hydroxy-3-
			methoxyamphetamine, 4-
		290.	# HMA
			Hydroxy-3-
			methoxyamphetamine, 4-
			# HMA
		291.	Norketamine
		292.	Norketamine
		293.	Norfentanyl
		294.	Norfentanyl
		295.	Bromo-2,5-
			dimethoxyamphetamine,
			1,4- # DOB
		296.	Bromo-2,5-
			dimethoxyamphetamine,
			1,4- # DOB
		297.	Diisoproyltryptamine
			formyl artifact
		298.	Diisoproyltryptamine, N,N-
			# DiPT
		299.	Diisoproyltryptamine
			N,N- # DiPT
		300.	Hydroxyquetiapine 7-
		301.	Hydroxyquetiapine 7-
		302.	Hydroxy-N-des{[2-(2-
			hydroxy)ethoxy]ethyl}
			Quetiapine
		303.	Hydroxy-N-des{[2-(2-
			hydroxy)ethoxy]ethyl}
			Quetiapine
		304.	
			Trifluoromethylphenylpiper
			azine 2-
		305.	
			Trifluoromethylphenylpiper
			azine 2-
		306.	
			Trifluoromethylphenylpiper
			azine 4-
		307.	
			Trifluoromethylphenylpiper
			azine 4-
		308.	Didesmethylvenlafaxine
			N,N-
		309.	Didesmethylvenlafaxine
			N,N-
		310.	Quetiapine sulfoxide
			(?artifact)
		311.	Quetiapine sulfoxide
			(?artifact)
		312.	N-Des[2-(2-
			hydroxyethoxy)ethyl]
			Quetiapine
		313.	N-Des[2-(2-
			hydroxyethoxy)ethyl]
			Quetiapine
		314.	Norverapamil
		315.	Norverapamil
		316.	Hydroxybupropion
			erythro metabolite
		317.	Hydroxybupropion
			erythro metabolite
		318.	Hydroxybupropion threo
			metabolite
		319.	Hydroxybupropion threo
			metabolite
		320.	Hydroxybupropion
			(morphinol metabolite)

321.	Hydroxybupropion (morphinol metabolite)	371.	Cocaethylene	416.	Didesmethylvenlafaxine
322.	Bromo-2,5-dimethoxyamphetamine 4- # DOB	372.	Cocaethylene	417.	Dehydronorketamine
323.	Bromo-2,5-dimethoxyamphetamine 4- # DOB	373.	Cocaethylene	418.	5-Methoxy-N,N-diisopropyltryptamine
324.	DOB Formyl artifact	374.	OXAZEPAM B'DOWN	419.	Diisopropyltryptamine, N,N-
325.	DOB Formyl artifact	375.	LORAZEPAM B'DOWN	420.	Methylenedioxyphenyl-2-butanamine, 3,4- # BDB
326.	Dimethoxy-4-methylamphetamine 2,5- # DOM	376.	Oxazepam artifact	421.	Hydrox-3-methoxyamphetamine, 4- # HMA
327.	DOM Formyl artifact	377.	Cyproheptadine	422.	Norvenlafaxine
328.	DOM Formyl artifact	378.	Flunitrazepam	423.	Fenethylamine
329.	Fenethylamine	379.	Flunitrazepam	424.	Hydroxy-N-des{[2-(2-hydroxy)ethoxy]ethyl} Quetiapine
330.	Fenethylamine	380.	Nifedipine artifact	425.	N-Des[2-(2-hydroxyethoxy)ethyl] Quetiapine
331.	Dihydroxymethamphetamine 3,4- # HHMA	381.	Nifedipine artifact	426.	Hydroxy-3-methoxymethylamphetamine # HMMA
332.	Dihydroxymethamphetamine 3,4- # HHMA	382.	Nifedipine artifact	427.	Norfentanyl
333.	Hydroxy-3-methoxymethylamphetamine 4-	383.	Nifedipine	428.	Norverapamil
334.	Hydroxy-3-methoxymethylamphetamine 4-	384.	Nifedipine	429.	Quetiapine sulfoxide (?artifact)
335.	Tetrazepam	385.	Zopiclone artifact # 2-Amino-5-chloropyridine	430.	Salvinorin-A
336.	Tetrazepam	386.	Zopiclone artifact # 2-Amino-5-chloropyridine	431.	Tetrazepam artifact
337.	Tetrazepam artifact	387.	Norketamine	432.	Tetrazepam
338.	Tetrazepam artifact	388.	Aminoflunitrazepam	433.	Tetrazepam
339.	Chlorophenylpiperazine 3- # CPP	389.	Aminoflunitrazepam	434.	Nicotinamide
340.	Desmethylvenlafaxine O-	390.	Pregabalin artifact	435.	RCS-4
341.	Desmethylvenlafaxine O-	391.	Pregabalin artifact	436.	WIN 55,212-2
342.	Desmethylvenlafaxine O-	392.	Ramelteon	437.	CP 55,940
343.	Norhydrocodone	393.	Ramelteon	438.	AM-694\$1-[(5-Fluoropentyl)-1H-indol-3-yl]-(2-iodophenyl)methanon
344.	Norhydrocodone	394.	Ropinirole	439.	JWH-398
345.	Salvinorin-A	395.	Ropinirole	440.	HU-308\$[(1R,2R,5R)-2-[2,6-dimethoxy-4-(2-methyloctan-2-yl)phenyl]-7,7-dimethyl-4-bicyclo[3.1.1]he
346.	Salvinorin-A	396.	Stiripentol	441.	HU-331
347.	Tadalafil	397.	Stiripentol	442.	N-Cyclopropyl-11-(3-hydroxy-5-pentylphenoxy)undecanamide\$CB-25
348.	Tadalafil	398.	Norverapamil	443.	N-Cyclopropyl-11-(2-hexyl-5-hydroxyphenoxy)undecanamide\$CB-52
349.	Vardenafil	399.	Fentanyl	444.	N-Ethyl-2-(3,4-methylenedioxyphenyl)propan-1-amine
350.	Vardenafil	400.	Metaxalone	445.	1-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-2-methylamino-propan-1-ol
351.	Lansoprazole breakdown	401.	Metaxalone	446.	4-Bromo-2,5-dimethoxybenzylpiperazine
352.	Lansoprazole breakdown	402.	Varenicline	447.	2-Bromo-4,5-dimethoxybenzylpiperazine
353.	Lansoprazole sulfide	403.	Varenicline	448.	4-Bromo-2,5-dimethoxybenzylpiperazine
354.	Lansoprazole sulfide	404.	2,5-Dimethoxy-4-ethylthiophenethylamine # 2 C-T-2	449.	AC
355.	Omeprazole sulfide	405.	2,5-Dimethoxy-4-ethylthiophenethylamine # 2 C-T-2		2-Bromo-4,5-
356.	Omeprazole sulfide	406.	2,5-Dimethoxy-4-isopropylthiophenethylamine # 2 C-T-4		
357.	Pantoprazole sulfide	407.	2,5-Dimethoxy-4-isopropylthiophenethylamine # 2 C-T-4		
358.	Pantoprazole sulfide	408.	2,5-Dimethoxy-4-ethylamphetamine # DOET		
359.	Rabeprazole sulfide	409.	2,5-Dimethoxy-4-ethylamphetamine # DOET		
360.	Rabeprazole sulfide	410.	2,5-Dimethoxy-4-iodoamphetamine # DOI		
361.	Pramipexole	411.	2,5-Dimethoxy-4-iodoamphetamine # DOI		
362.	Pramipexole	412.	Trifluoromethylphenylpiperazine, 2-		
363.	Ambroxol	413.	Trifluoromethylphenylpiperazine, 4-		
364.	Ambroxol	414.	Benzylpiperazine, N- # BZP		
365.	Biperiden	415.	Dimethoxy-4-methylamphetamine, 2,5- # DOM		
366.	Biperiden				
367.	Penfluridol				
368.	Penfluridol				
369.	Solifenacin				
370.	Solifenacin				

	dimethoxybenzylpiperazine AC		ylmethyl)-1H-indole, RI(ZB5MS) 3129 , TOF01404.7rw		yl)phenyl)cyclohexyl acetate, RI(ZB5MS) 2756, TOF01304-C
450.	1,4-Di(4-Bromo-2,5-dimethoxybenzyl)piperazine	479.	1-butyl-3-(naphthalen-1-ylmethyl)-1H-indole, RI(ZB5MS) 2841 , TOF01406.7rw	495.	(1R,3S)-3-(2-acetoxy-4-(2-methylnonan-2-yl)phenyl)cyclohexyl acetate, RI(ZB5MS) 2749, TOF01304-C
451.	1,4-Di(2-Bromo-4,5-dimethoxybenzyl)piperazine	480.	3-(naphthalen-1-ylmethyl)-1-pentyl-1H-indole, RI(ZB5MS) 2936 , TOF01342-Centroided.7rw	496.	2-((1S,3S)-3-hydroxycyclohexyl)-5-(2-methylnonan-2-yl)phenol, RI(ZB5MS) 2717, TOF01306-Centroid
452.	3,4-Methylenedioxy-N-(2-hydroxyethyl)amphetamine (MDHOET)	481.	(1-hexyl-1H-indol-3-yl)(naphthalen-1-yl)methanone, RI(ZB5MS) 3371 TOF01313-Centroided.7rw	497.	2-((1S,3R)-3-hydroxycyclohexyl)-5-(2-methylnonan-2-yl)phenol, RI(ZB5MS) 2732, TOF01306-Centroid
453.	3,4-Methylenedioxy-N-(2-hydroxyethyl)amphetamine (MDHOET) - bisAcetylated	482.	naphthalen-1-yl(1-pentyl-1H-indol-3-yl)methanone, RI(ZB5MS) 3261, TOF01313-Centroided.7rw	498.	Butylone
454.	2,4-Dimethoxy-3-methylphenethylamine	483.	(1-butyl-1H-indol-3-yl)(naphthalen-1-yl)methanone, RI(ZB5MS) 3166, TOF01313	499.	Butylone, PFP-
455.	5-MeO-DMT 5-Methoxy-N,N-dimethyltryptamine	484.	(1-heptyl-1H-indol-3-yl)(naphthalen-1-yl)methanone, RI(ZB5MS) > 3400, TOF01371-Centroided.7rw	500.	Butylone, TFA-
456.	5-Methoxy-N,N-diisopropyltryptamine	485.	naphthalen-1-yl(1-propyl-1H-indol-3-yl)methanone, RI(ZB5MS) 3083, TOF01347-Centroided.7rw	501.	Butylone, acetyl-
457.	4-(2-aminopropyl)-2,3-dihydro-1H-indene (4-IAP)	486.	1-butyl-1H-indole, RI(ZB5MS) 1525, TOF01299-Centroided.cdf	502.	MDPV
458.	5-(2-aminopropyl)-2,3-dihydro-1H-indene (5-IAP)	487.	1-hexyl-1H-indole, RI(ZB5MS) 1727, TOF01299-Centroided.cdf	503.	Mephedrone
459.	4-Methoxy-N-ethylamphetamine	488.	1-pentyl-1H-indole, RI(ZB5MS) 1620, TOF01287-Centroided.cdf	504.	Mephedrone, acetyl-
460.	acetylcathinone	489.	1-heptyl-1H-indole, RI(ZB5MS) 1827, TOF01338-Centroided.7rw	505.	Mephedrone, TFA-
461.	dimethylcathinone	490.	1-propyl-1H-indole, RI(ZB5MS) 1425, TOF01325-Centroided.7rw	506.	Fluoroamphetamine Ac
462.	ethcathinone	491.	3-(naphthalen-1-ylmethyl)-1-propyl-1H-indole, RI(ZB5MS) 2757, TOF01409.7rw	507.	Fluoroamphetamine PrO
463.	2C-B-FLY	492.	trimethyl(5-(2-methylnonan-2-yl)-2-((1S,3S)-3-(trimethylsilyloxy)cyclohexyl)phenoxy)silane, RI(ZB5MS)	508.	FMA Ac
464.	3C-B-FLY	493.	trimethyl(5-(2-methylnonan-2-yl)-2-((1S,3R)-3-(trimethylsilyloxy)cyclohexyl)phenoxy)silane, RI(ZB5MS)	509.	FMA -M (-OH) 2Ac
465.	3C-B-FLY(norm to 254m/z)	494.	(1S,3S)-3-(2-acetoxy-4-(2-methylnonan-2-yl)phenyl)cyclohexyl acetate, RI(ZB5MS) 2756, TOF01304-C	510.	FMA -M(HO-) 2PRO
466.	3C-B-DragonFLY			511.	FMA -M(HO-) 2TFA
467.	3C-B-DragonFLY (norm to 142m/z)			512.	FMA -PrO
468.	(D) 1-(3-METHYLPHENYL)PIPERAZINE 1-(4-FLUOROPHENYL)PIPERAZINE 1-(3-methylphenyl)piperazine			513.	FMA TFA
469.	1-(4-FLUOROPHENYL)PIPERAZINE 1-(3-methylphenyl)piperazine			514.	TFMPP
470.	1-(3-methylphenyl)piperazine			515.	TFMPP - M(trifluoromethylaniline) Ac
471.	3-FLUOROISOMETHCATHINONE - by-product of synthesis of 3-FMC			516.	TFMPP Ac
472.	4-METHOXY-METHYLAMINO BUTYRONE 1-(4-methoxyphenyl)-2-(methylamino)butan-1-one			517.	TFMPP HFB
473.	bupropion			518.	TFMPP -M(HO-) 2Ac
474.	DOCl			519.	TFMPP -M(HO-, trifluoromethylaniline) 2Ac
475.	ethacathinone 2-(ethylamino)-1-phenylpropan-1-one			520.	TFMPP PrO
476.	MBZP 1-Methyl-4-benzylpiperazine (MBZP)			521.	CP 47,497-C8 Z-izomer
477.	1-hexyl-3-(naphthalen-1-ylmethyl)-1H-indole, RI(ZB5MS) 3030, TOF01403.7rw			522.	Salvinorin A
478.	1-heptyl-3-(naphthalen-1-ylmethyl)-1H-indole, RI(ZB5MS) 3129 , TOF01404.7rw			523.	Salvinorin B
				524.	CP47,497-C8 E-izomer
				525.	Salvinorin C
				526.	Mefedrone (4-MMC)
				527.	O-2482 (Naphyrone) 1-(2-naphthyl)-2-(1-pyrrolidinyl)-1-pentanone
				528.	Desoxypipradrol (2-DPMP)
				529.	2C-B AC
				530.	2C-B PFP
				531.	2C-B PrO
				532.	2C-B TFA
				533.	Mescaline 2AC
				534.	Mescaline 2TFA
				535.	Mescaline PFP
				536.	Mescaline PrO
				537.	DIMETHOCAINE
				538.	DIMETHOCAINE-AC
				539.	DIMETHOCAINE-PFP
				540.	DIMETHOCAINE-PRO

**541.** DIMETHOCAINE-TFA  
**542.** a-PBP  
**543.** 25-C-NBOMe Ac  
**544.** 25-C-NBOMe PFP  
**545.** 25-C-NBOMe PrO  
**546.** 25-C-NBOMe TFA  
**547.** 25H-NBOMe Ac  
**548.** 25H-NBOMe PFP  
**549.** 25H-NBOMe PrO  
**550.** 25H-NBOMe TFA  
**551.** 25I-NBOMe Ac  
**552.** 25I-NBOMe PFP  
**553.** 25I-NBOMe PrO  
**554.** 25I-NBOMe TFA  
**555.** 5-MeO-MiPT PFP  
**556.** 5-MeO-MiPT PrO  
**557.** 5-MeO-MiPT TFA  
**558.** 2C-D PFP  
**559.** 2C-D TFA  
**560.** Pregabalin cyclic artefact  
**561.** Diphenylamine  
**562.** THJ-018  
**563.** THJ-2201  
**564.** N,N-Diethyl-2-(1-pentyl-1H-indol-3-yl)-4-thiazolemethanamine  
**565.** N-(2-Methoxyethyl),N-isopropyl-2-(1-pentyl-1H-indol-3-yl)-4-thiazolemethanamine  
**566.** 1-benzyl-4-methylpiperazine\$MBZP  
**567.** 1,4-dibenzylpiperazine  
**568.** 1-(1,3-benzodioxol-5-yl)-2-(benzylamino)propan-1-one  
**569.** Phenylephrine  
**570.** 5-MeOMIPT\$5-MeO-methylisopropiltryptamin  
**571.** 5-MeODIPT\$5-MeO-dilisopropiltryptamin  
**572.** 4-AcDIPT\$4-Ac-dilisopropiltryptamin  
**573.** 4-AcMIPT\$4-Ac-methylisopropiltryptamin  
**574.** 4-OHDIPT\$4-OH-diisopropiltryptamin  
**575.** DPT\$dipropiltryptamin  
**576.** MIPT\$methylisopropiltryptamin  
**577.** AMT\$alphamethyltryptamin  
**578.** 3,4-MDBP  
**579.** 4-MeOPP  
**580.** impurity to RCS-4  
**581.** impurity to RCS-4  
**582.** Pentedrone  
**583.** FUB-PB-22 marker TMS  
**584.** 584 5-MeOAMT\$5-MeO-alphamethyltryptamin  
**585.** a-PVT  
**586.** α-PVT  
**587.** 5-IT  
**588.** AH 7921  
**589.** AH-7921  
**590.** 5-IT  
**591.** MT-45  
**592.** α-Tocopheryl acetate  
**593.** FUB-PB-22 marker Me  
**594.** ??? FUB-PB-22 M-OH Me ???  
**595.** AB-PINACA-M1 (COOH), methyl-  
**596.** AB-PINACA-M1 (COOH), TMS-  
**597.** ADBICA  
**598.** ADBICA-5F  
**599.** CP-47,497-C8 isomer, diacetyl-  
**600.** CP-47,497-C8 isomer, diPFP-  
**601.** CP-47,497-C8 isomer, diTFA-  
**602.** CP-47,497-C8, di-TMS-  
**603.** CP-47,497-C8, diacetyl-  
**604.** CP-47,497-C8, diPFP-  
**605.** CP-47,497-C8, diTFA-  
**606.** CP47,497-C8  
**607.** CP47,497-C8 isomer  
**608.** CP-47,497-C8 isomer, methyl-  
**609.** CP-47,497-C8, methyl-  
**610.** FUB-PB-22-ACID-OH-TMS  
**611.** AB-FUBINACA M (...indazol-3-carbonic acid), methyl-  
**612.** AB-FUBINACA M1, bis-TMS-  
**613.** AB-FUBINACA M1, methyl-, N-TMS-  
**614.** AB-FUBINACA M2 (Indazol-OH), dimethyl-  
**615.** AB-FUBINACA M2 (Indazol-OH), methyl-, acetyl-  
**616.** AB-FUBINACA, bis-TMS-  
**617.** PB-22 M2 (COOCH<sub>3</sub>, OTMS)  
**618.** PB-22 M2 diTMS  
**619.** PB-22 M2 methyl-  
**620.** PB-22 M2 methyl- acetyl-  
**621.** PB-22 M3 methyl-  
**622.** PB-22 M3 TMS  
**623.** PB-22 M4 (Alk-COOH), dimethyl-  
**624.** PB-22 M5 (di-OH), dimethyl-  
**625.** PB-22F M2 (alk-OH) diTMS  
**626.** PB-22F M2 (alk-OH) methyl-  
**627.** PB-22F M3 (des-F, COOH) dimethyl-  
**628.** PB-22F M3 (des-F, COOH) diTMS  
**629.** PB-22F M4 (Aryl-OH) dimethyl-  
**630.** AB-CHMINACA M2 (3-COOH), methyl-  
**631.** AB-CHMINACA M3 (OH), diTMS-  
**632.** AB-CHMINACA M3 (OH), methyl-  
**633.** AB-CHMINACA M3 (OH), methyl-, O-acetyl-  
**634.** AB-CHMINACA M4 (2'-OH), methyl- O-acetyl-  
**635.** AB-CHMINACA M4 (2'-OH), methyl-  
**636.** AB-PINACA-M6 (3-COOH), methyl-  
**637.** AB-PINACA-M5 (4-OH alk), methyl-  
**638.** FUB-PB-22 M1 (marker), ethyl-  
**639.** FUB-PB-22 M2, dimethyl-  
**640.** FUB-PB-22 M2, diTMS  
**641.** FUB-PB-22 M2, monomethyl-  
**642.** FUB-PB-22 M2, PFPA/PFPOH  
**643.** AB-CHMINACA M1 (marker), PFP-  
**644.** AB-FUBINACA M1 PFP-  
**645.** AB-PINACA-M1 (COOH), PFP-  
**646.** AB-PINACA-M2 (COOH, oxo=), PFP-  
**647.** ??? FUB-PB-22 M-OH PFP ???  
**648.** FUB-PB-22 marker PFP  
**649.** SDB-006  
**650.** (E)-4-Chloro-N-(1-(4-nitrophenylethyl)piperidin-2-ylidene)sulfonamide W-15  
**651.** Naphthalene, 1-methoxy-  
**652.** Silane, trimethyl(1-naphthalenyloxy)-  
**653.** XLR11 M28 (-COOH) degradan2cyclo Me  
**654.** XLR11 M27 (-COOH) degradant Me  
**655.** XLR11 M28 (-COOH) degradant Me  
**656.** XLR11 M28 (-COOH) degradant TMS  
**657.** 5-fluoro-AKB48 N-(5-hydroxypentyl) metabolite  
**658.** AB-PINACA N-(5-hydroxypentyl) metabolite  
**659.** AKB48 N-(4-hydroxypentyl) metabolite  
**660.** AKB48 N-(5-hydroxypentyl) metabolite  
**661.** AM2201 5-hydroxyindole metabolite  
**662.** AM2201 6-hydroxyindole metabolite  
**663.** AM2201 7-hydroxyindole metabolite  
**664.** AM2201 N-(4-hydroxypentyl) metabolite  
**665.** Buphedrone metabolite  
**666.** JWH 018 N-(4-oxo-pentyl) metabolite  
**667.** JWH-018 N-(2-

669.	hydroxypentyl) metabolite	704.	hydroxypentyl) metabolite	735.	JWH 203 N-(5-hydroxypentyl) metabolite
670.	JWH-018 N-(3-hydroxypentyl) metabolite	705.	UR-144 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	736.	JWH 210 N-(4-hydroxypentyl) metabolite
671.	JWH-018 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	706.	XLR11 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	737.	JWH 210 N-(5-hydroxypentyl) metabolite
672.	JWH-018 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	707.	$\alpha$ -Pyrrolidinopentiophenone metabolite	738.	JWH 250 5-hydroxyindole metabolite
673.	JWH-019 5-hydroxyindole metabolite	708.	( $\pm$ )-JWH 018 N-(2-hydroxypentyl) metabolite	739.	JWH 250 N-(4-hydroxypentyl) metabolite
674.	JWH-019 N-(6-hydroxyhexyl) metabolite	709.	( $\pm$ )-JWH 018 N-(3-hydroxypentyl) metabolite	740.	JWH 250 N-(5-hydroxypentyl) metabolite
675.	JWH-019 N-(6-hydroxyhexyl) metabolite	710.	( $\pm$ )-JWH 018 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	741.	JWH 398 N-(4-hydroxypentyl) metabolite
676.	JWH-073 2-hydroxyindole metabolite	711.	( $\pm$ )-UR-144 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	742.	JWH-018 N-(5-hydroxypentyl) metabolite-d5
677.	JWH-073 N-(2-hydroxybutyl) metabolite	712.	5-fluoro-AKB48 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	743.	MDPV metabolite 2
678.	JWH-073 N-(3-hydroxybutyl) metabolite	713.	$\alpha$ -Pyrrolidinopentiophenone metabolite 1	744.	JWH-022(indazol)\$\$\$3-(1-Naphthoyl)-1-(pent-4-enyl)indazol\$\$\$ (InChI=1/C24H21NO/c1-2-3-8-16-25-1
679.	JWH-081 4-hydroxynaphthyl metabolite	714.	AB-PINACA N-(5-hydroxypentyl) metabolite	745.	JWH-018(indazol) N-(5-hydroxypentyl) metabolite\$\$\$ InChI=1/C23H22N2O2/c26-16-7-1-6-15-25-21-1
680.	JWH-081 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	715.	AKB48 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	746.	AM(indazol)-2201-C5-chain-OH-TMS-iso-3\$\$\$
681.	JWH-081 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	716.	AKB48 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	747.	AM(indazol)-2201-C5-chain-OH-TMS-iso-2\$\$\$
682.	JWH-122 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	717.	JWH 018 N-(4-oxo-pentyl) metabolite	748.	AM(indazol)-2201-C5-chain-OH-TMS-iso1\$\$\$
683.	JWH-122 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	718.	JWH 018 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	749.	AM(indazol)-2201-C5-chain-OH-TMS-iso-4\$\$\$
684.	JWH-122 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	719.	JWH 019 5-hydroxyindole metabolite	750.	JWH-018(Indazol)-5OH-TMS
685.	JWH-200 4-hydroxyindole metabolite	720.	JWH 019 N-(5-hydroxyhexyl) metabolite	751.	JWH-018(Indazole)-5-OH-TMS\$\$\$ InChI=1/C26H30N2O2Si/c1-31(2,3)30-19-10-4-9-18-28-24-17-8-7-1
686.	JWH-200 5-hydroxyindole metabolite	721.	JWH 019 N-(6-hydroxyhexyl) metabolite	752.	JWH-018(Indazole)-5-COOH-TMS\$\$\$ InChI=1/C26H28N2O3Si/c1-32(2,3)31-24(29)17-8-9-18-28-23-16
687.	JWH-200 6-hydroxyindole metabolite	722.	JWH 073 2-hydroxyindole metabolite	753.	THJ2201-M5 (-COOH) Me
688.	JWH-200 7-hydroxyindole metabolite	723.	JWH 073 N-(2-hydroxybutyl) metabolite	754.	THJ2201-M5 (-COOH) TMS
689.	JWH-203 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	724.	JWH 073 N-(3-hydroxybutyl) metabolite	755.	THJ2201-M1 (5-OH) TMS
690.	JWH-203 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	725.	JWH 073 N-(4-hydroxybutyl) metabolite	756.	THJ2201-M (-C2-COOH) TMS
691.	JWH-210 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	726.	JWH 081 4-hydroxynaphthyl metabolite	757.	THJ2201-M (C2-COOH) Me
692.	JWH-210 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	727.	JWH 081 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	758.	Quinoline, 8-methoxy-
693.	JWH-250 5-hydroxyindole metabolite	728.	JWH 081 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	759.	AKB48-M1-TMS
694.	JWH-250 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	729.	JWH 122 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	760.	THJ-2201 M2 (-F, COOH), TMS
695.	JWH-250 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	730.	JWH 122 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	761.	THJ-2201 M1 (-C2H4F, COOH), TMS-
696.	JWH-398 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	731.	JWH 200 4-hydroxyindole metabolite	762.	AM-2201 (-C2H4F, 3-COOH), methyl-
697.	MDPV metabolite	732.	JWH 200 5-hydroxyindole metabolite	763.	THJ-2201-M2 (-F, Alk-COOH), methyl-
698.	Normephedrone	733.	JWH 200 6-hydroxyindole metabolite	764.	THJ-2201-M1 (-C2H4F, COOH), methyl-
699.	RCS-4 4-hydroxyphenyl metabolite	734.	JWH 200 7-hydroxyindole metabolite		
700.	RCS-4 M10 Metabolite		JWH 203 N-(4-hydroxypentyl) metabolite		
701.	RCS-4 M11 metabolite				
702.	RCS-4 M9 metabolite				
703.	RCS-4 N-(4-hydroxypentyl) metabolite				
	RCS-4 N-(5-				

765. THJ-2201-M4 (-F, Alk-4-en, indazol-OH), methyl-  
766. XLR11 M28 # UR-144 # TMCP-018, N-pentanoic acid metabolite, methyl- (thermal isomer)  
767. XLR11 (-F, COOH) degradant, methyl-  
768. XLR11 (-C2H4F, 3-COOH) # UR-144 M (-C2H4, 3-COOH) thermoisomer, methyl-  
769. XLR11 M28 # UR-144 # TMCP-018, N-pentanoic acid metabolite, methyl-  
770. MMB-2201  
771. MMB-2201 M (-COOH) TMS  
772. MMB-2201 marker, TMS-  
773. MMB-2201 marker, ethyl-  
774. MMB-2201 marker, di-TMS-  
775. MMB-2201 / MMB-2201 marker, methyl-  
776. MMB-2201  
777. JWH-018(N) (dealkyl-HO-indazol) isomer-di TMS Ether\$\$\$ (hydroxy-1H-indazol-3-yl)(naphthalen-1-yl)m  
778. JWH-018(N) (dealkyl-HO-indazol) isomer-2 -di TMS Ether\$\$\$ (hydroxy-1H-indazol-3-yl)(naphthalen-1-yl)  
779. JWH-018(N) dealkyl-HO-naphthyl isomer-1 di TMS Ether\$\$\$  
780. JWH-018(N) dealkyl-HO-naphthoyl isomer-2 di TMS Ether  
781. JWH-018(N) (dealkyl-HO-indazol) isomer-3 di TMS Ether\$\$\$ (hydroxy-1H-indazol-3-yl)(naphthalen-1-yl)  
782. FUB-PB-22 marker TMS  
783. THJ2201-M5-2TMS  
784. THJ2201-M6-TMS  
785. THJ2201-M3-2TMS  
786. THJ2201-M4-TMS  
787. JWH-018(N) (dealkyl-2\*HO-indazol) isomer\$\$\$ (dihydroxy-1H-indazol-3-yl)(naphthalen-1-yl)methanon  
788. MDMA-CHMINACA, TMS #  
789. MDMA-CHMINACA marker TMS # MDMA-CHMINACA marker TMS  
790. MDMA-CHMINACA M2, diTMS # MDMA-CHMINACA M2, diTMS  
791. MDMA-CHMINACA M1, TMS # MDMA-CHMINACA M1, TMS
792. MDMA-CHMINACA # MDMA-CHMINACA  
793. MDMA-CHMINACA TMS-  
794. CBL-2201  
795. 1-Naphthalenol  
796. QCBL(N)-2201-M marker, methyl-  
797. MDMA-CHMINACA  
798. ADB-CHMINACA marker TMS-  
799. ADB-CHMINACA marker 2TMS-  
800. Ketoprofen TMS  
801. JWH-250-M (HO-chain-) isomer-1  
802. JWH-250-M (HO-phenyl-HO-chain-) isomer-3  
803. JWH-250-M (HO-phenyl-HO-chain-) isomer-4  
804. JWH-250-M (HO-phenyl-oxo-) isomer-2  
805. JWH-210-M (dealkyl-di-HO-ethylnaphthalene) Me2TMS  
806. JWH-073-M (dealkyl-HO-naphthalene-) isomer-1 2Me  
807. JWH-073-M (dealkyl-HO-indol-) isomer-2 2Me  
808. JWH-073-M (dealkyl-HO-indol-) isomer-1 2Me  
809. JWH-018-M (HOOC-) Me  
810. AB-001-M (HO-adamantyl-) isomer-1 TMS  
811. AB-001-M (HO-adamantyl-) isomer-2 TMS  
812. AB-001-M (HO-adamantyl-) isomer-3 TMS  
813. AB-001-M (3-HO-adamantyl-) isomer-1 3TMS  
814. AB-001-M (HO-chain-HO-adamantyl-) isomer-1 2TMS  
815. AB-001-M (dealkyl-HO-adamantyl-) isomer-3 MeTMS  
816. AB-001-M (dealkyl-HO-adamantyl-) isomer-2 MeTMS  
817. AB-001-M (dealkyl-HO-adamantyl-) isomer-1 MeTMS  
818. AM-694-M (HO-chain-) isomer-2 TMS  
819. AM-694-M (HO-chain-) isomer-1 TMS  
820. AM-694-M (defluoro-HO-chain-) TMS  
821. JWH-073-M (dealkyl-HO-naphthalene-) isomer-2 2Me  
822. JWH-251-M (HO-chain-) isomer-1  
823. JWH-251-M (HO-chain-) isomer-1 AC  
824. JWH-251-M (HO-chain-HO-indol-) isomer-1 2TMS  
825. JWH-251-M (HO-chain-) isomer-1 TMS  
826. JWH-251-M (HO-chain-) isomer-3 TMS  
827. JWH-203-M (HO-chain-) isomer-2 AC  
828. JWH-203-M (HO-chain-) isomer-1 AC  
829. AB-001-M (dealkyl-HO-adamantyl) isomer-1 2TMS  
830. JWH-073-M (dealkyl-HO-naphthalene-) isomer-2 2TMS  
831. JWH-073-M (dealkyl-HO-naphthalene-) isomer-1 2TMS  
832. JWH-073-M (dealkyl-HO-indol-) isomer-2 2TMS  
833. JWH-073-M (dealkyl-HO-indol-) isomer-1 2TMS  
834. JWH-203-M (HO-chain-) isomer-1  
835. JWH-203-M (dealkyl-HO-indol) isomer-1 2TMS  
836. JWH-203-M (HO-chain-HO-indol) isomer-1 2TMS  
837. JWH-203-M (HO-chain-) isomer-2 TMS  
838. JWH-203-M (HO-chain-) isomer-1 TMS  
839. AB-001-M (dealkyl-HO-adamantyl-) isomer-1  
840. AB-001-M (dealkyl-HO-adamantyl-) isomer-3  
841. AB-001-M (dealkyl-HO-adamantyl) isomer-3 2TMS  
842. JWH-250-M (dealkyl-HO-indol-) isomer-2 2TMS  
843. JWH-250-M (dealkyl-HO-phenyl-) isomer-2 2TMS  
844. JWH-018-M (HO-chain-HO-indol-) 2TMS  
845. JWH-018-M (HO-chain-HO-naphthalene-) isomer-1 2TMS  
846. JWH-018-M (HOOC-) TMS  
847. JWH-018-M isomer-1 TFA/artifact (pentenyl)  
848. JWH-210-M (3-HO-) isomer-1 3TMS  
849. JWH-210-M (HO-ethyl-HO-chain-) isomer-1 2TMS  
850. JWH-210-M (HO-ethyl-HO-indol-) 2TMS  
851. JWH-210-M (HO-ethyl-) TMS  
852. JWH-210-M (oxo-ethyl-HO-chain-) TMS  
853. JWH-250-M (3-HO-) isomer-1 3TMS  
854. JWH-250-M (3-HO-) isomer-2 3TMS  
855. JWH-250-M (dealkyl-HO-

indol-) isomer-2 2AC  
**856.** JWH-250-M (dealkyl-HO-phenyl-) isomer-2 2AC  
**857.** JWH-250-M (HO-chain-) isomer-1 AC  
**858.** JWH-250-M (HO-chain-) isomer-1 TMS  
**859.** JWH-250-M (HO-phenyl-HO-chain-) isomer-3 2AC  
**860.** JWH-250-M (HO-phenyl-HO-chain-) isomer-4 2AC  
**861.** JWH-250-M (HO-phenyl-HO-chain-) isomer-3 2TMS  
**862.** JWH-250-M (HO-phenyl-HO-chain-) isomer-4 2TMS  
**863.** JWH-250-M (HO-phenyl-oxo-) isomer-1 AC  
**864.** JWH-250-M (HO-phenyl-oxo-) isomer-2 AC  
**865.** JWH-250-M (HO-phenyl-oxo-) isomer-1 TMS  
**866.** JWH-250-M (HO-phenyl-oxo-) isomer-2 TMS  
**867.** JWH-250-M (HO-phenyl-) TMS  
**868.** JWH-251-M (HO-chain-HO-methylphenyl-) isomer-2 2TMS  
**869.** RCS-4  
**870.** RCS-4-M (HO-indol-N-dealkyl-) isomer-2 2TMS  
**871.** RCS-4-M (HO-phenyl-HO-chain-) 2AC  
**872.** RCS-4-M (HO-phenyl-HO-chain-) 2TMS  
**873.** RCS-4-M (HO-phenyl-HO-chain-)  
**874.** RCS-4-M (HO-phenyl-oxo-)  
**875.** RCS-4-M (O-demethyl-HO-chain-) isomer-2 2TMS  
**876.** RCS-4-M (O-demethyl-HO-chain-) isomer-2  
**877.** RCS-4-M (O-demethyl-HO-chain-) isomer-2 2AC  
**878.** RCS-4-M (O-demethyl-N-dealkyl-) 2TMS  
**879.** RCS-4-M (O-demethyl-oxo-) AC  
**880.** RCS-4-M (O-demethyl-oxo-) TMS  
**881.** RCS-4-M (O-demethyl-oxo-)  
**882.** AM-694-M (HOOC-) Me  
**883.** AM-694-M (HOOC-) TMS  
**884.** UR-144 HY TMS  
**885.** UR-144 HY/artifact  
**886.** UR-144 artifact  
**887.** UR-144  
**888.** UR-144 (F-chain-)  
**889.** UR-144 (F-chain-) artifact  
**890.** PB-22-M HY PFP  
**891.** AKB-48-M (HO-adamantyl-) TMS  
**892.** AKB-48-M (di-HO-) 2TMS  
**893.** AKB-48-M (tri-HO-) 3TMS  
**894.** AKB-48-M (tri-HO-) 2TMS  
**895.** AKB-48-M (dealkyl-HO-adamantyl-) 2TMS  
**896.** AKB-48-M (dealkyl-di-HO-adamantyl-) 3TMS  
**897.** AKB-48F-M (HO-adamantyl-HOOC-) 2TMS  
**898.** CP 47,497 C8 (cis)  
**899.** CP 47,497 C8 (trans)  
**900.** CP 47,497 C8 2AC 1  
**901.** CP 47,497 C8 2AC 2  
**902.** CP 47,497 C8 2TFA1  
**903.** CP 47,497 C8 2TFA2  
**904.** CP 47,497 C8 2TMS  
**905.** CP 47,497 C8 TFA1  
**906.** CP 47,497 C8 TFA2  
**907.** JWH-073-M/artifact (HOnaphthalene-HO-chain-) isomer-1 2TMS  
**908.** JWH-073-M/artifact (HOnaphthalene-) isomer-2 TMS  
**909.** JWH-073-M/artifact (HOnaphthalene-) isomer-1 TMS  
**910.** JWH-073-M/artifact (HOnaphthalene-HO-chain-) isomer-2 2TMS  
**911.** JWH-018-M (HO-chain-) isomer-1 TMS  
**912.** JWH-018-M (HO-chain-) isomer-1 TFA  
**913.** JWH-018-M (HO-chain-) isomer-2 TFA  
**914.** JWH-018-M (HO-chain-) isomer-1 AC  
**915.** JWH-018-M (HO-chain-) isomer-2 AC  
**916.** JWH-018-M (HO-chain-) isomer-1  
**917.** JWH-018-M (HO-chain-) isomer-2 TMS  
**918.** JWH-073-M (HO-chain-) isomer-1 TMS  
**919.** JWH-073-M (HO-chain-) isomer-2 TMS  
**920.** AM-694  
**921.** JWH-018  
**922.** JWH-073  
**923.** JWH-203  
**924.** JWH-210  
**925.** JWH-250  
**926.** JWH-251  
**927.** UR-144-M/artifact (di-HO-) isomer-1  
**928.** UR-144-M/artifact (di-HO-) isomer-2  
**929.** UR-144-M (HO-heptyl-) +H2O (dehydro-) TMS  
**930.** UR-144-M (HO-heptyl-) +H2O 2TMS  
**931.** UR-144-M (di-HO-) isomer-1 +H2O 3TMS  
**932.** UR-144-M (di-HO-) isomer-1 +H2O (dehydro) 2TMS  
**933.** UR-144-M (di-HO-) isomer-2 +H2O (dehydro) 2TMS  
**934.** UR-144-M (di-HO-) isomer-2 +H2O 3TMS  
**935.** UR-144-M/artifact (HOCycle-) TMS  
**936.** UR-144-M/artifact (HO-chain-) +H2O (dehydro) TMS  
**937.** UR-144-M/artifact (HO-chain-) +H2O 2TMS  
**938.** UR-144-M/artifact (di-HO-) isomer-1 +H2O 3TMS  
**939.** UR-144-M/artifact (di-HO-) isomer-1 +H2O (dehydro) 2TMS  
**940.** UR-144-M/artifact (di-HO-) isomer-2 +H2O (dehydro) 2TMS  
**941.** UR-144-M/artifact (di-HO-) isomer-2 +H2O 3TMS  
**942.** UR-144-M/artifact (HOheptyl-)  
**943.** UR-144-M/artifact (HO-chain-)  
**944.** PB-22  
**945.** PB-22F  
**946.** AKB-48F  
**947.** AKB-48  
**948.** AM-2233-M (nor-) AC  
**949.** AM-2233  
**950.** AM-2233-M (nor-)  
**951.** PB-22-M HY (HO-chain-) 2TMS  
**952.** PB-22-M HY (oxo-) TMS  
**953.** PB-22-M HY TMS  
**954.** PB-22F-M HY TMS  
**955.** PB-22F-M HY (HOOC-) 2TMS  
**956.** PB-22F-M HY PFP  
**957.** JWH-175  
**958.** AM-2201  
**959.** AB-FUBINACA  
**960.** AB-FPINACA  
**961.** AB-CHMINACA  
**962.** BB-22-M HY PFP  
**963.** BB-22-M HY (HO-) PFP  
**964.** AB-FUBINACA-M (indazole HOOC-) TMS  
**965.** AB-FUBINACA-M (HOOC-) TMS  
**966.** AB-PINACA-M (oxo-HOOC-) TMS  
**967.** AB-PINACA-M (HOOC-) TMS  
**968.** FDU-PB22  
**969.** FUB-PB22  
**970.** JWH-307  
**971.** JWH-081  
**972.** STS-135  
**973.** AB-001  
**974.** 8-Hydroxyquinoline  
**975.** 8-Hydroxyquinoline TMS  
**976.** MAM-2201



<b>977.</b>	AB-CHMINACA-M (HOOC-HO-) 2TMS	<b>1019.</b>	AM-694	<b>1080.</b>	N-TFA-MXE
<b>978.</b>	AB-CHMINACA-M (HOOC-) TMS	<b>1020.</b>	AM-1220	<b>1081.</b>	JWH-200
<b>979.</b>	ADB-CHMINACA-M (HOOC-) TMS	<b>1021.</b>	3-(4-Metoxycarbonyl)-1-butylindol	<b>1082.</b>	JWH-018
<b>980.</b>	ADB-CHMINACA-M (HOOC-HO-) 2TMS	<b>1022.</b>	3-FMC	<b>1083.</b>	Caffeine
<b>981.</b>	AB-FPINACA-M (HOOC-) TMS	<b>1023.</b>	3-FisoMC	<b>1084.</b>	JWH-022
<b>982.</b>	ADB-CHMINACA (MeO-) CBL-2201	<b>1024.</b>	6-desoxycodeine	<b>1085.</b>	4-MA
<b>983.</b>	1-Naphthol AC	<b>1025.</b>	4-FMC	<b>1086.</b>	4-FA
<b>984.</b>	1-Naphthol TMS	<b>1026.</b>	Salvinorin A	<b>1087.</b>	N-Acetyl-4-MA
<b>985.</b>	1-Naphthol	<b>1027.</b>	Salvinorin B	<b>1088.</b>	N-Acetyl-4-FA
<b>986.</b>	AB-PINACA	<b>1028.</b>	N-Acetyl-Pentylone	<b>1089.</b>	N-ethylcathinone
<b>987.</b>	THJ-2201	<b>1029.</b>	JWH-203	<b>1090.</b>	iso-Pentadrone
<b>988.</b>	THJ-2201-M/artifact (defluoro-di-HO-) 2TMS	<b>1030.</b>	JWH-251	<b>1091.</b>	JWH-370
<b>989.</b>	THJ-2201-M/artifact (defluoro-HOOC-HO-) 2TMS	<b>1031.</b>	Pentadrone	<b>1092.</b>	AM-2233
<b>990.</b>	THJ-2201-M/artifact (HO-naphthalene-) TMS	<b>1032.</b>	Tofisopamum ???? (ne podtverzhen)	<b>1093.</b>	2C-I-NBOMe
<b>991.</b>	THJ-2201-M (dealkyl-HO-indazol-) 2TMS	<b>1033.</b>	Salvinorin C	<b>1094.</b>	2C-P
<b>992.</b>	THJ-2201-M	<b>1034.</b>	DON	<b>1095.</b>	N-Acetyl-MDTHIQ
<b>993.</b>	(defluoroethyl-HOOC-) TMS	<b>1035.</b>	N-Acetyl-4-MEC	<b>1096.</b>	Phenobarbital
<b>994.</b>	THJ-2201-M (defluoro-HO-) TMS	<b>1036.</b>	N-acetyl Mefedrone	<b>1097.</b>	Benzonale
<b>995.</b>	THJ-2201-M (defluoro-HOOC-) TMS	<b>1037.</b>	N-Acetyl-Pentadrone	<b>1098.</b>	Diazepam
<b>996.</b>	FUBIMINA	<b>1038.</b>	N-Acetyl-PMMA	<b>1099.</b>	AM-2201
<b>997.</b>	Naphtol-1 PFP	<b>1039.</b>	N-TFA-PMMA	<b>1100.</b>	JWH-018Cl
<b>998.</b>	THJ-2201-M (-F, HO-) PFP	<b>1040.</b>	JWH-018	<b>1101.</b>	Methyl stearate
<b>999.</b>	THJ-2201-M (-F,COOH-) PFP	<b>1041.</b>	2C-I	<b>1102.</b>	JWH-018Br
<b>1000.</b>	THJ-2201 M (alkyl HO-) PFP	<b>1042.</b>	2C-E	<b>1103.</b>	MXE
<b>1001.</b>	THJ-2201 M1 (-C2H4F+COOH) PFP	<b>1043.</b>	Methoxetamine	<b>1104.</b>	Methandrostenolone
<b>1002.</b>	AB-PINACA-M3.2 (2COOH), 2TMS-	<b>1044.</b>	2-Diphenylmethylpyrrolidine	<b>1105.</b>	N-Acetyl-2C-I
<b>1003.</b>	DOVES Tablet Uncown compaund #1	<b>1045.</b>	N-Acetyl-Benzedrone	<b>1106.</b>	N,N-Diacetyl-2C-I
<b>1004.</b>	DOVES Tablet Uncown compaund #2	<b>1046.</b>	Methedrone	<b>1107.</b>	N-Acetyl-MXE
<b>1005.</b>	fenozepam	<b>1047.</b>	Benzedrone	<b>1108.</b>	O-2482
<b>1006.</b>	Butylone (bk-MBDB)   1-(1,3-benzodioxol-5-yl)-2-(methylamino)butan-1-one	<b>1048.</b>	Benzedrone	<b>1109.</b>	N-Acetyl-2C-E
<b>1007.</b>	Tramadol	<b>1049.</b>	N-Acetyl-iso-Pentadrone (ne podtv!!!)	<b>1110.</b>	Artefact Naphyrone
<b>1008.</b>	Diffusion pump fluid	<b>1050.</b>	N-Acetyl-Methedrone	<b>1111.</b>	2C-C-NBOMe
<b>1009.</b>	JWH-210	<b>1051.</b>	JWH-011	<b>1112.</b>	JWH-122
<b>1010.</b>	JWH-250	<b>1052.</b>	JWH-011	<b>1113.</b>	Desomorphine
<b>1011.</b>	MDPBP	<b>1053.</b>	Artefact MDPV	<b>1114.</b>	Levomycetin (O,O-Diacetyl-)
<b>1012.</b>	O-2482	<b>1054.</b>	Artefact MDPBP	<b>1115.</b>	Levomycetin
<b>1013.</b>	Desoxypipradrol	<b>1055.</b>	Artefact PVP	<b>1116.</b>	RCS-4-ortho (C4-homologue)
<b>1014.</b>	N-Acetyl-2-Diphenylmethylpyrrolidine (????)	<b>1056.</b>	CP47,497-C8 E-izomer	<b>1117.</b>	5-MeO-DALT
<b>1015.</b>	N-Acetyl Desoxypipradrol	<b>1057.</b>	CP 47,497-C8 Z-izomer	<b>1118.</b>	3-TMCP-indol
<b>1016.</b>	JWH-073	<b>1058.</b>	Nicotine	<b>1119.</b>	N-TFA-2C-C-NBOMe
<b>1017.</b>	JWH-073	<b>1059.</b>	4-MEC	<b>1120.</b>	AM-2233Cl
<b>1018.</b>	DBZP ?????	<b>1060.</b>	AM-1220	<b>1121.</b>	Sibutramine
		<b>1061.</b>	3-(2-methoxybenzoyl)-1-pentylindol	<b>1122.</b>	Ethylone
		<b>1062.</b>	JWH-192 ?	<b>1123.</b>	MDTHIQ
		<b>1063.</b>	RCS-4	<b>1124.</b>	4-FMA
		<b>1064.</b>	Methamphetamine	<b>1125.</b>	AM-2233
		<b>1065.</b>	N-TFA-MDAI	<b>1126.</b>	MPPP
		<b>1066.</b>	MDAI	<b>1127.</b>	Pentylone
		<b>1067.</b>	N-TFA-5-APB	<b>1128.</b>	N-Acetyl-Ethylone
		<b>1068.</b>	N-TFA-6-APB	<b>1129.</b>	N-TFA-Ethylone
		<b>1069.</b>	MPA	<b>1130.</b>	JWH-081
		<b>1070.</b>	TFA-MPA	<b>1131.</b>	6-APB (it is NOT confirmed)
		<b>1071.</b>	Asaleptin	<b>1132.</b>	5-APB (it is NOT confirmed)
		<b>1072.</b>	JWH-019	<b>1133.</b>	Dimethocaine
		<b>1073.</b>	Oleamide	<b>1134.</b>	N-Acetyl-Dimethocaine
		<b>1074.</b>	N-TFA-4-MEC	<b>1135.</b>	N-Acetyl-AMT
		<b>1075.</b>	Cannabidiol	<b>1136.</b>	AMT
		<b>1076.</b>	Tetrahydrocannabinol	<b>1137.</b>	AMT, Acetone
		<b>1077.</b>	Cannabinol	<b>1138.</b>	Dimethocaine, Acetone
		<b>1078.</b>	MDAI	<b>1139.</b>	Dimethocaine, N,N-dimethylaminebenzaldehyde
		<b>1079.</b>	JWH-307		

1140. AMT, N,N-dimethylaminebenzaldehyde-  
1141. AMT, Acetone cond.  
1142. dehydro, JWH-122  
1143. URB-602  
1144. 3-isocyanatobiphenyl  
1145. 5'-hydroxybiphenyl-3-carboxamide  
1146. 5'-hydroxy-N-(trimethylsilyl)biphenyl-3-carboxamide  
1147. N-(trimethylsilyl)-5'-(trimethylsilyloxy)biphenyl-3-carboxamide  
1148. Tropicamide  
1149. O-Acetyl-Tropicamide  
1150. Oxycodone  
1151. Fentanyl  
1152. O-Acetyl-Oxycodone  
1153. BMDP  
1154. JWH-122F  
1155. AB-001  
1156. 6-methyl-3-p-tolyl-1H-quinazoline-2,4-dione  
1157. URB754  
1158. TMCP-018  
1159. URB754, N-TFA-  
1160. 2,2,3,3-tetramethyl-N'-(2-oxo-1-pentylindolin-3-ylidene)cyclopropanecarbohydrazide  
1161. Desmethylfenanyl  
1162. 2,2,3,3-tetramethyl-N'-(2-oxo-1-pentylindolin-3-ylidene)cyclopropanecarbohydrazide  
1163. 2,2,2-trifluoro-N'-(2-oxo-1-pentylindolin-3-ylidene)acetohydrazide  
1164. URB754, TMS-  
1165. MPA, N-Acetyl-  
1166. TMCP-200 (1)  
1167. TMCP-200 (2)  
1168. GBR-12935  
1169. Stanozolol  
1170. Benzyl Benzoate  
1171. Testosterone propionate  
1172. Testosterone isocaproate  
1173. Testosterone Decanoate  
1174. Testosterone Phenylpropionate  
1175.  $\alpha$ -Tocopheryl acetate  
1176. Amphetamine  
1177. Testosterone enanthate  
1178. Ephedrine  
1179. Chlorphenamine  
1180. Dyphylline  
1181. Dyphylline, diacetate  
1182. Ephedrine, N-Acetyl  
1183. Diacetyephedrine  
1184. Benzoic acid, 2,5-dichloro-, methyl ester  
1185. MPA  
1186.  $\alpha$ -PVP  
1187. CB-13  
1188. Furanamine  
1189. Furanamine, N-Acetyl-  
1190. Furanamine, N-Acetone-  
1191. TMCP-022  
1192. MDMA  
1193. Nandrolone decanoate  
1194. Dimedrol  
1195. MDMA, N-Acetyl-  
1196. TMCP-2232  
1197. Ketamine  
1198. A-836,339  
1199. A-834,735  
1200. Tributylamine  
1201. 6-desoxymorphine  
1202. (1-(5-fluoropentyl)-1H-indol-3-yl)(pyridin-3-yl)methanone  
1203. AKB48-2H  
1204. (7-methoxy-1-pentyl-1H-indol-3-yl)(3,4,5-trimethylpiperazin-1-yl)methanone  
1205. ethyl 1-pentyl-1H-indole-3-carboxylate  
1206. Boldenone 10-undecenoate  
1207. AKB48-2H  
1208. AKB48  
1209. Diclofensine  
1210. Diclofensine  
1211. LR-5182  
1212. LR-5182  
1213. ACbm-022  
1214. ACBM  
1215. N-(naphthalen-1-yl)-1-(pent-4-enyl)-1H-indole-3-carboxamide  
1216. 6'-methoxy-4-(2-methyloctan-2-yl)biphenyl-2-ol  
1217. AKB-48Cl  
1218. Heliamine  
1219. MDA-19F  
1220. 2,2,2-trifluoro-N'-(1-(5-fluoropentyl)-2-oxoindolin-3-ylidene)acetohydrazide  
1221. Iso-ethcathinone  
1222. N-ethylcathinone  
1223. Ethcathinone AC  
1224. N-Acetyl-iso-EC  
1225. UR-144F  
1226. ACBM(N)  
1227. ACBM(N)-022  
1228. Artefact Benocyclidine  
1229. Benocyclidine  
1230. BTCPDE  
1231. BTCPy  
1232. quinolin-8-yl 4-methyl-3-(piperidin-1-ylsulfonyl)benzoate  
1233. Phenolphthalein  
1234. SEP-225,289 Acetone adduct  
1235. SEP-225,289, Acetyl-  
1236. Phenolphthalein, Acetyl-  
1237. Phenolphthalein, DiAcetyl-  
1238. isomer MN-001  
1239. 1-benzyl-6-fluoro-1H-benzo[d]imidazol-2(3H)-one  
1240. (5-allyl-2-cyclopentyl-2,3,4,5-tetrahydro-1H-pyrido[4,3-b]indol-8-yl)(4-methylpiperidin-1-yl)methanone  
1241. N-(1-amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl)-3-benzyl-5-fluoro-2-oxo-2,3-dihydro-1H-benzo[d]imidazole-1-c  
1242. (5-allyl-2-(tetrahydrothiophen-3-yl)-2,3,4,5-tetrahydro-1H-pyrido[4,3-b]indol-8-yl)(4-methylpiperidin-1-yl)methanone  
1243. O-2172  
1244. STS-135  
1245. AKB-48F  
1246. methyl 1-pentyl-1H-indole-3-carboxylate  
1247. methyl 1-(5-fluoropentyl)-1H-indole-3-carboxylate  
1248. BK-4  
1249. ClK-4  
1250. PB-22Cl  
1251. Tiletamine  
1252. Allyl Mescaline  
1253. FluoroBenzotropine  
1254. ethyl 6-ethyl-4-oxo-1,4-dihydroquinoline-3-carboxylate  
1255. ethyl 6-ethyl-4-oxo-1,4-dihydroquinoline-3-carboxylate  
1256. butyl 6-ethyl-4-oxo-1,4-dihydroquinoline-3-carboxylate  
1257. QCBL-022  
1258. N-(1-(6-methylpyridin-2-yl)propan-2-yl)acetamide  
1259. N-acetyl-N-(1-(6-methylpyridin-2-yl)propan-2-yl)acetamide  
1260. 1-(6-methylpyridin-2-yl)propan-2-amine  
1261. 1-(6-methylpyridin-2-yl)propan-2-amine  
1262. 1-(6-methylpyridin-2-yl)-N-(propan-2-ylidene)propan-2-amine  
1263. 2C-B-NBOMe ME  
1264.  $\alpha$ -PVT  
1265. Artefakt a-PVT  
1266. 2-(4-(allyloxy)-3,5-dimethoxyphenyl)ethanamine  
1267. BZP-2201  
1268. LY-2183240  
1269. Desmethyl Mescaline  
1270. artefakt PHP  
1271.  $\alpha$ -PHP  
1272. Super degradant a-PHP

	(not confirmed)	<b>1316.</b> MBA-2201 artefact (-NH3)	1H-indole-3-carboxylate
<b>1273.</b>	N-methyl-10,11-dihydro-5H-dibenzo[a,d][7]annulene-5-carboxamide	<b>1317.</b> MMB-2201	<b>1371.</b> ACBM(N)-BZ-F
<b>1274.</b>	KL-OH	<b>1318.</b> PB-FUB	<b>1372.</b> ACBM(N)-BZ-F
<b>1275.</b>	BB-22	<b>1319.</b> α-PVP oxo- metabolite	<b>1373.</b> 1-Isocyanatoadamantane
<b>1276.</b>	ADM-018	<b>1320.</b> α-Pyrrolidinovalerophenone metabolite 1	<b>1374.</b> MBA-2201
<b>1277.</b>	TMCP-1220	<b>1321.</b> W-15	<b>1375.</b> MBA-2201 artefact (-NH3)
<b>1278.</b>	AB-FUBINACA	<b>1322.</b> MPhP-2201	<b>1376.</b> ACBM(N)-BZ-F
<b>1279.</b>	ADBICA-F	<b>1323.</b> QCBL(N-pir)-2201	<b>1377.</b> EG-018
<b>1280.</b>	AB-FPINACA	<b>1324.</b> THJ-018	<b>1378.</b> MDMB(N)-2201
<b>1281.</b>	5Cl-AB-PINACA	<b>1325.</b> AM(N)-2201	<b>1379.</b> MDMB(N)-018Cl
<b>1282.</b>	AB-PINACA(-2H)	<b>1326.</b> 1-(4-fluorobenzyl)-1H-indole-3-carboxylic acid	<b>1380.</b> MDMB(N)-022
<b>1283.</b>	naphthalen-1-yl(1-(pent-4-en-1-yl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)methanone	<b>1327.</b> CBL(N)-2201	<b>1381.</b> 5-APB-NBOMe
<b>1284.</b>	(1-(5-chloropentyl)-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)(naphthalen-1-yl)methanone	<b>1328.</b> CBL(N)-022	<b>1382.</b> 5-MAPB-NBOMe
<b>1285.</b>	ethyl 1-(5-chloropentyl)-1H-indole-3-carboxylate	<b>1329.</b> 4F-α-PVP	<b>1383.</b> 4-CMC
<b>1286.</b>	5-MeO-NBpBrT	<b>1330.</b> α-PHP	<b>1384.</b> 5-MAPB
<b>1287.</b>	4-MeO-α-PVP	<b>1331.</b> MDPV	<b>1385.</b> Tadalafil
<b>1288.</b>	Artefact 4-MeO-α-PVP	<b>1332.</b> Pregabalin	<b>1386.</b> Yohimbine
<b>1289.</b>	Superdegradant 4-MeO-α-PVP	<b>1333.</b> MITRAGYNINE	<b>1387.</b> Pramipexole
<b>1290.</b>	5-MeO-NBpBrT, N-Acetylmethyl 1-(4-fluorobenzyl)-1H-indole-3-carboxylate	<b>1334.</b> AB-PINACA	<b>1388.</b> MDMB(N)-018OH
<b>1291.</b>	CBM(N)-018	<b>1335.</b> ADBICA	<b>1389.</b> PX-01
<b>1292.</b>	4F-α-PVP Artefact	<b>1336.</b> AB-CHMINACA	<b>1390.</b> 2C-B
<b>1293.</b>	4F-α-PBP	<b>1337.</b> MDMB(N)-CHM	<b>1391.</b> Acetylfentanyl M(HO-) isomer2 PrO
<b>1294.</b>	4F-α-PBP Artefact	<b>1338.</b> SEP-225,289	<b>1392.</b> Acetylfentanyl M(HO-) isomer2 Ac
<b>1295.</b>	4F-α-PVP	<b>1339.</b> NNEI	<b>1393.</b> Acetylfentanyl M(desacetyl-, nor-) 2TFA
<b>1296.</b>	PB(N)-FUB	<b>1340.</b> NNEI	<b>1394.</b> Acetylfentanyl M(desacetyl-, nor-) 2PrO
<b>1297.</b>	JWH(N)-18Cl	<b>1341.</b> CBM-2201	<b>1395.</b> Acetylfentanyl M(desacetyl-, nor-) 2PFP
<b>1298.</b>	JWH(N)-022	<b>1342.</b> PB-22F	<b>1396.</b> Acetylfentanyl M(desacetyl-) PFP
<b>1299.</b>	JWH(N)-022	<b>1343.</b> PB-22F	<b>1397.</b> Acetylfentanyl M(desacetyl-) TFA
<b>1300.</b>	bk-MDDMA	<b>1344.</b> MMB(N)-018Cl	<b>1398.</b> Acetylfentanyl M(nor-) PFP
<b>1301.</b>	bk-MDDMA Degradant	<b>1345.</b> MMB(N)-022	<b>1399.</b> Acetylfentanyl M(nor-) PrO
<b>1302.</b>	ethyl 1-(4-fluorobenzyl)-1H-indole-3-carboxylate	<b>1346.</b> 1-(benzo[d][1,3]dioxol-5-yl)-2-chloropropan-1-one	<b>1400.</b> Acetylfentanyl M(nor-) Ac
<b>1303.</b>	N-(2-(p-tolyl)cyclopropyl)acetamide	<b>1347.</b> MXP	<b>1401.</b> Acetylfentanyl M(nor-) TFA
<b>1304.</b>	N-methyl-2,3-dihydro-1H-inden-2-amine	<b>1348.</b> CBL-018	<b>1402.</b> Acetylfentanyl M(nor-) TFA
<b>1305.</b>	6-fluoro-1-(naphthalen-1-yl)methyl)-2-(pyridin-3-yl)-1H-benzo[d]imidazole	<b>1349.</b> MMB(N)-2201	<b>1403.</b> Acetylfentanyl M(HO-, MeO-) PrO
<b>1306.</b>	naphthalen-1-yl(1-pentyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)methanone	<b>1350.</b> CBL-2201	<b>1404.</b> Acetylfentanyl M(HO-, MeO-) PFP
<b>1307.</b>	thienopentedrone	<b>1351.</b> Termoliz TMCP-022	<b>1405.</b> Acetylfentanyl M(HO-, MeO-) TMS
<b>1308.</b>	N-methyl-N-(1-oxo-1-(thiophen-2-yl)pentan-2-yl)acetamide	<b>1352.</b> Termoliz TMCP-018	<b>1406.</b> Acetylfentanyl M(HO-) TMS
<b>1309.</b>	FDU-PB22	<b>1353.</b> Termoliz UR-144F	<b>1407.</b> Acetylfentanyl M(HO-, MeO-) Ac
<b>1310.</b>	RH-34	<b>1354.</b> Mephedrone	<b>1408.</b> Acetylfentanyl M(desacetyl-, HO-) 2PrO
<b>1311.</b>	RH-34 artefact?	<b>1355.</b> PB(N)-22	<b>1409.</b> Acetylfentanyl M(HO-) isomer1 PrO
<b>1312.</b>	SDB-006F	<b>1356.</b> AM-2232	<b>1410.</b> Acetylfentanyl M(desacetyl-, HO-, MeO-) 2PrO
<b>1313.</b>	SDB-006 (-2H)	<b>1357.</b> JWH-122F	<b>1411.</b> Acetylfentanyl M(HO-) isomer1 PFP
<b>1314.</b>	CBL-022	<b>1358.</b> QCBL(N)-2201	<b>1412.</b> Acetylfentanyl M(HO-) isomer1 Ac
<b>1315.</b>	MMB-022	<b>1359.</b> FUBIMINA	<b>1413.</b> Acetylfentanyl M(2HO-) 2PFP
		<b>1360.</b> FUBIMINA	<b>1414.</b> Acetylfentanyl M(desacetyl-, HO-) 2PFP
		<b>1361.</b> NM-018Cl	<b>1415.</b> Acetylfentanyl
		<b>1362.</b> NM-018MeO	
		<b>1363.</b> methyl 1-(pent-4-en-1-yl)-1H-indole-3-carboxylate	
		<b>1364.</b> methyl 1-(5-methoxypentyl)-1H-indole-3-carboxylate	
		<b>1365.</b> methyl 1-(5-chloropentyl)-1H-indole-3-carboxylate	
		<b>1366.</b> NM-018EtOH	
		<b>1367.</b> ethyl 1-(pent-4-en-1-yl)-1H-indole-3-carboxylate	
		<b>1368.</b> ethyl 1-(5-fluoropentyl)-1H-indole-3-carboxylate	
		<b>1369.</b> NM-018EtOH	
		<b>1370.</b> ethyl 1-(5-chloropentyl)-	

- M(desacetyl-, HO-,MeO-) 2PFP **1460.** ADB-FUBINACA
- 1416.** Acetylfentanyl **1461.**  $\alpha$ -PBP
- M(desacetyl-, 2HO-) 3PFP **1462.** 1-phenyl-2-(pyrrolidin-1-yl)but-2-en-1-one
- 1417.** Acetylfentanyl M(2HO-) 2Ac **1463.** DMBA(N)-CHM
- 1418.** Acetylfentanyl M(nor-) ethylformat artifact **1464.** MDMB(N)-CHM
- 1419.** Acetylfentanyl M(desacetyl-) **1465.** MMB(N)-Bz-F
- 1420.** Acetylfentanyl
- 1421.** MDBM-CHM artefact
- 1422.** MDBM-CHM artefact
- 1423.** MDMB-CHMINACA
- 1424.** MDMB(N)-CHM
- 1425.** 4-Methylbuphedrone
- 1426.** SDB-006
- 1427.** SDB-006
- 1428.** MMB(N)-2201
- 1429.** methyl 1-(5-fluoropentyl)-1H-pyrrolo[2,3-c]pyridine-3-carboxylate
- 1430.** Dimethocaine
- 1431.**  $\alpha$ -PHP
- 1432.** DMBA(O)-CHM
- 1433.** EMB(N)-CHM
- 1434.** PMB(N)-CHM
- 1435.** MBAcid(N)-CHM
- 1436.** MBAcid(N)-CHM
- 1437.** MMB(N)-CHM
- 1438.** Amfonelic acid
- 1439.** 4-CMC
- 1440.** 4-CMC, -TFA
- 1441.** 4-CMC, -TFA
- 1442.** MDMB(N)-FUB
- 1443.** MPA(N)-2201
- 1444.** Nomifensine
- 1445.** Nomifensine, Acetone adduct-
- 1446.** Nomifensine, Acetone adduct-
- 1447.** Nomifensine, TFA-
- 1448.** MDMB(N)-Bz-F
- 1449.** MDMB-Bz-F
- 1450.** MDMB-Bz-F
- 1451.** AB-CHMINACA metabolite M1A
- 1452.** ADB-PINACA N-(4-hydroxypentyl) metabolite
- 1453.** ADB-PINACA N-(5-hydroxypentyl) metabolite
- 1454.** ADBICA N-(4-hydroxypentyl) metabolite
- 1455.** ADBICA N-(5-hydroxypentyl) metabolite
- 1456.** XLR11 6-hydroxyindole metabolite
- 1457.** MDMB(N)-Bz-F Marker TMS \$\$\$ ADB-FUBINACA Marker TMS
- 1458.** MDMB(N)-FUB-M (COOH) TMS \$\$\$ ADB-FUBINACA Marker TMS
- 1459.** MDMB(N)-Bz-F Marker PFP \$\$\$ ADB-FUBINACA Marker PFP