

«Современные исследования новых психоактивных веществ с целью возможного отнесения их к аналогам наркотических средств»

Выполнила: Коростелева Анна Сергеевна,

провизор-интерн аналитической токсикологии,
фармацевтической химии и фармакогнозии

Руководитель: Лисовская Светлана Борисовна,

доцент кафедры аналитической токсикологии,
фармацевтической химии и фармакогнозии, канд. фарм. наук



Цель исследования: использование методов трансляционной медицины для формирования комплексного подхода отнесения новых потенциально опасных психоактивных веществ к аналогам наркотических средств

Задачи исследования

- Оценить существующие подходы отнесения новых потенциально опасных психоактивных веществ к аналогам наркотических средств для решения вопросов экспертно-криминалистической практики.
- Рассмотреть основные методы физико-химического исследования, используемые для установления структуры вещества.
- При проведении фармакологической экспертизы аналога оценить возможность использования метода компьютерного молекулярного моделирования лиганд-рецепторного взаимодействия с помощью компьютерных программ, имеющих общее название «molecular docking software».

ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

В рамках Федерального закона № 3-ФЗ от 08.01. 1998 г.

«О наркотических средствах и психотропных веществах»

- **Наркотические средства** - вещества синтетического или естественного происхождения, препараты, включенные в Перечень наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров, подлежащих контролю в Российской Федерации, в соответствии с законодательством Российской Федерации, международными договорами Российской Федерации, в том числе Единой конвенцией о наркотических средствах 1961 года

- **Аналоги наркотических средств и психотропных веществ** - запрещенные для оборота в Российской Федерации вещества синтетического или естественного происхождения, не включенные в Перечень наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров, подлежащих контролю в Российской Федерации, химическая структура и свойства которых **сходны с химической структурой** и со **свойствами** наркотических средств и психотропных **веществ, психоактивное действие которых они воспроизводят.**



Производные наркотических средств и психотропных веществ являются веществами синтетического или естественного происхождения, которые не включены самостоятельными позициями в государственный реестр лекарственных средств или в настоящий перечень, химическая структура которых образована заменой (формальным замещением) одного или нескольких атомов водорода, галогенов и (или) гидроксильных групп в химической структуре соответствующего наркотического средства или психотропного вещества на иные одновалентные и (или) двухвалентные атомы или заместители (за исключением гидроксильной и карбоксильной групп), суммарное количество атомов углерода в которых не должно превышать количество атомов углерода в исходной химической структуре соответствующего наркотического средства или психотропного вещества. [Постановление Правительства РФ № 1178 от 19.11.2012]

В случае если одно и то же вещество может быть отнесено к производным нескольких наркотических средств или психотропных веществ, оно признаётся производным наркотического средства или психотропного вещества, изменение химической структуры которого требует введения наименьшего количества заместителей и атомов.

Новые потенциально опасные психоактивные вещества (НПОПВ) – вещества синтетического или естественного происхождения, включенные в Реестр новых потенциально опасных психоактивных веществ, оборот которых в Российской Федерации запрещен. Согласно соответствующей статье ФЗ, в этот Реестр включаются вещества, вызывающие у человека состояние наркотического или иного токсикологического опьянения, опасное для его жизни и здоровья, в отношении которых уполномоченными органами государственной власти РФ не установлены санитарно-эпидемиологические требования либо меры контроля за их оборотом. [ФЗ от 3 февраля 2015 г. № 7]

«Дизайнерские» наркотики (designer drugs) - вещества, синтезированные на основании результатов молекулярного моделирования химических структур, способных взаимодействовать с биологическими мишенями (рецепторами) аналогично классическим наркотическим средствам.

К 2015 г. в Российской Федерации:

- Объем изъятия «спайсов» и дизайнерских наркотиков увеличился в 130 раз и составил 22 т. (по сравнению с 2008 г.)
- Известны 734 смеси – только 44 из них включены в официальный перечень запрещенных веществ.



□ Исследуемый «дизайнерский» наркотик, не внесенный в Перечень НС и ПВ

Аналог НС и ПВ:

- измененная структура НС;
- СХОДСТВО ПСИХОАКТИВНОГО ДЕЙСТВИЯ

Производное НС и ПВ:

- незначительно измененная структура НС

Новое потенциально опасное психоактивное вещество:

- СХОДНОЕ С НАРКОТИЧЕСКИМ ПСИХОАКТИВНОЕ ДЕЙСТВИЕ

Сформированный подход по отнесению к аналогам НСПВ

Химико-фармакологическая экспертиза

Описательная часть



Химическая часть исследования



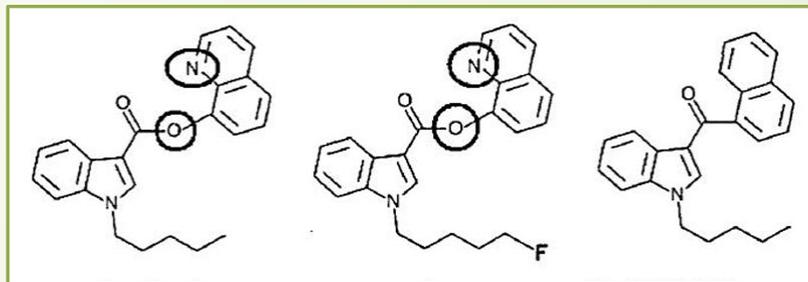
Биологическая часть исследования



Формирование экспертного заключения



Сравнение структурных формул веществ РВ-22, РВ-22F и JWH-018

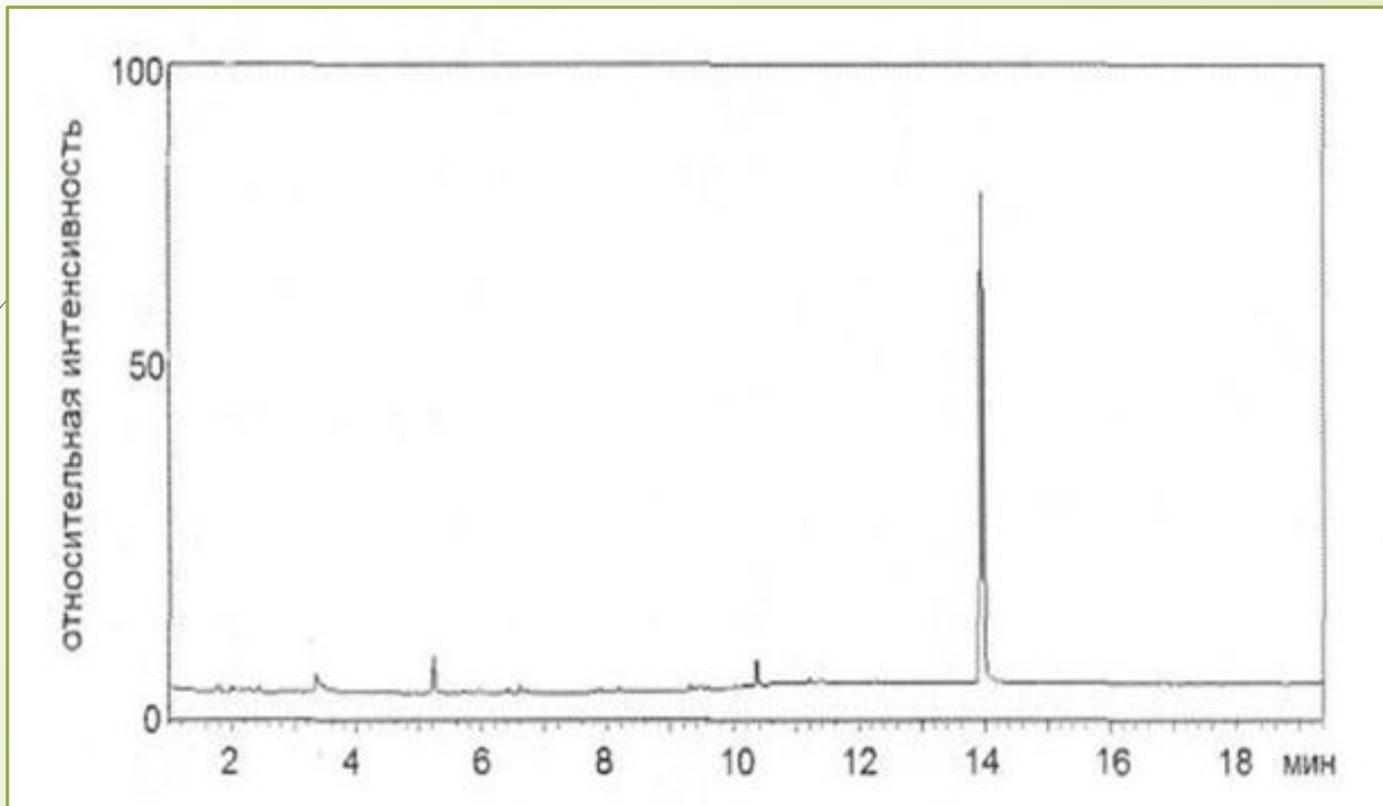


На основании проведенных химических и биологических исследований сделан вывод о том, что вещества РВ-22 и РВ-22F являются аналогами наркотического средства JWH-018 [(нафталин-1-ил)(1-пентил-1H-индол-3-ил)метанон], включенного в Список I «Список наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров, оборот которых в РФ запрещен в соответствии с законодательством РФ и международными договорами РФ» Перечня наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров, подлежащих контролю в РФ, утвержденного постановлением Правительства № 681 от 30.06.1998 г.

Структура взаимодействий центра по изучению новых психоактивных веществ



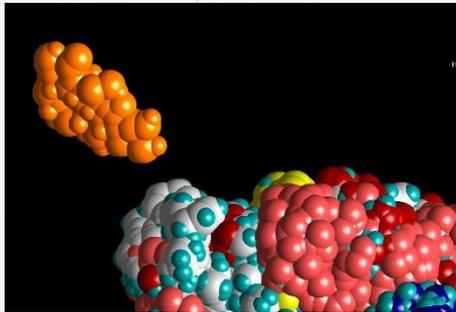
Скрининг и определение некоторых НСПВ природного и синтетического происхождения в растительных объектах и образцах криминалистической экспертизы методами ВЭЖХ-МС/МС и ГХ-МС



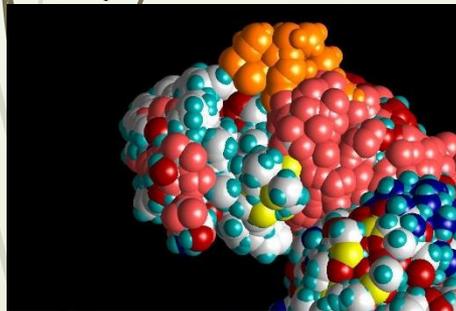
Хроматограмма экстракта курительной смеси по полному ионному току (TIC)

Прогнозирование и молекулярное моделирование

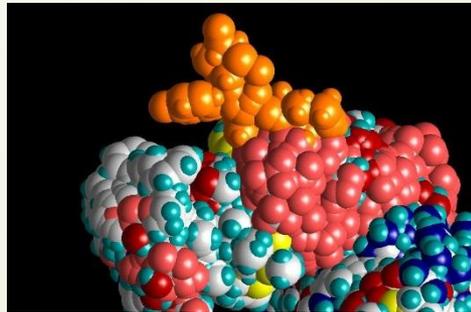
Молекула доксициклина
нет связи с CB_1 рецептором



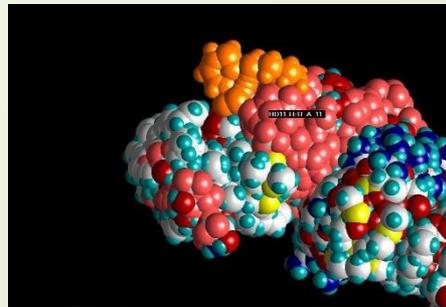
Молекула РВ 22 агонист
имеет высокую афинность
с CB_1 рецептором



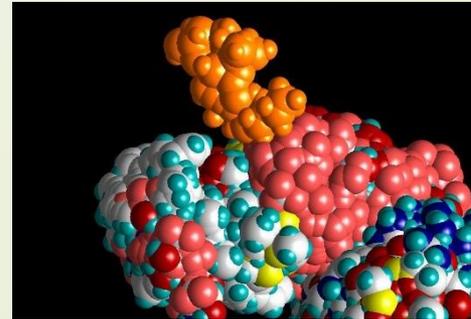
Молекула римонабант антагонист
имеет высокую афинность
с CB_1 рецептором



Молекула АКВ48(APINACA) агонист
имеет высокую афинность
с CB_1 рецептором



Молекула Δ^9 -тетрагидроканнабинол
частичный антагонист имеет афинность
с CB_1 рецептором



Auto Dock Vina – программа для
изучения межмолекулярного
взаимодействия и ACDLabs

ВЫВОДЫ

Химиико-фармакологическая экспертиза с использованием методов трансляционной медицины формирует комплексный подход к оценке психотропных свойств новых психоактивных веществ, на основании которых они могут быть отнесены к аналогам существующих наркотических средств.

Описательная часть

Химическая часть
исследования

Компьютерное
моделирование

Биологическая часть
исследования

Формирование
экспертного
заключения