


# **«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



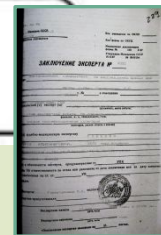
Химическая часть исследования



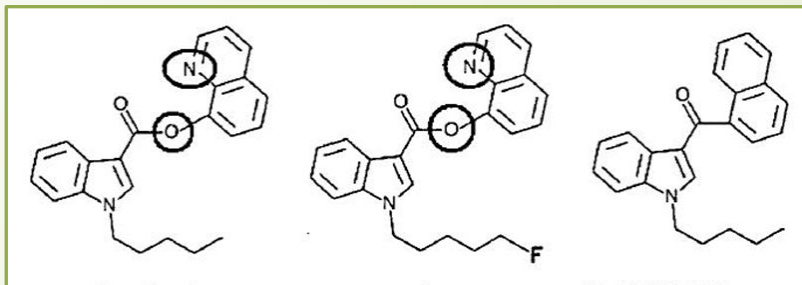
Биологическая часть исследования



Формирование экспертного  
заключения



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



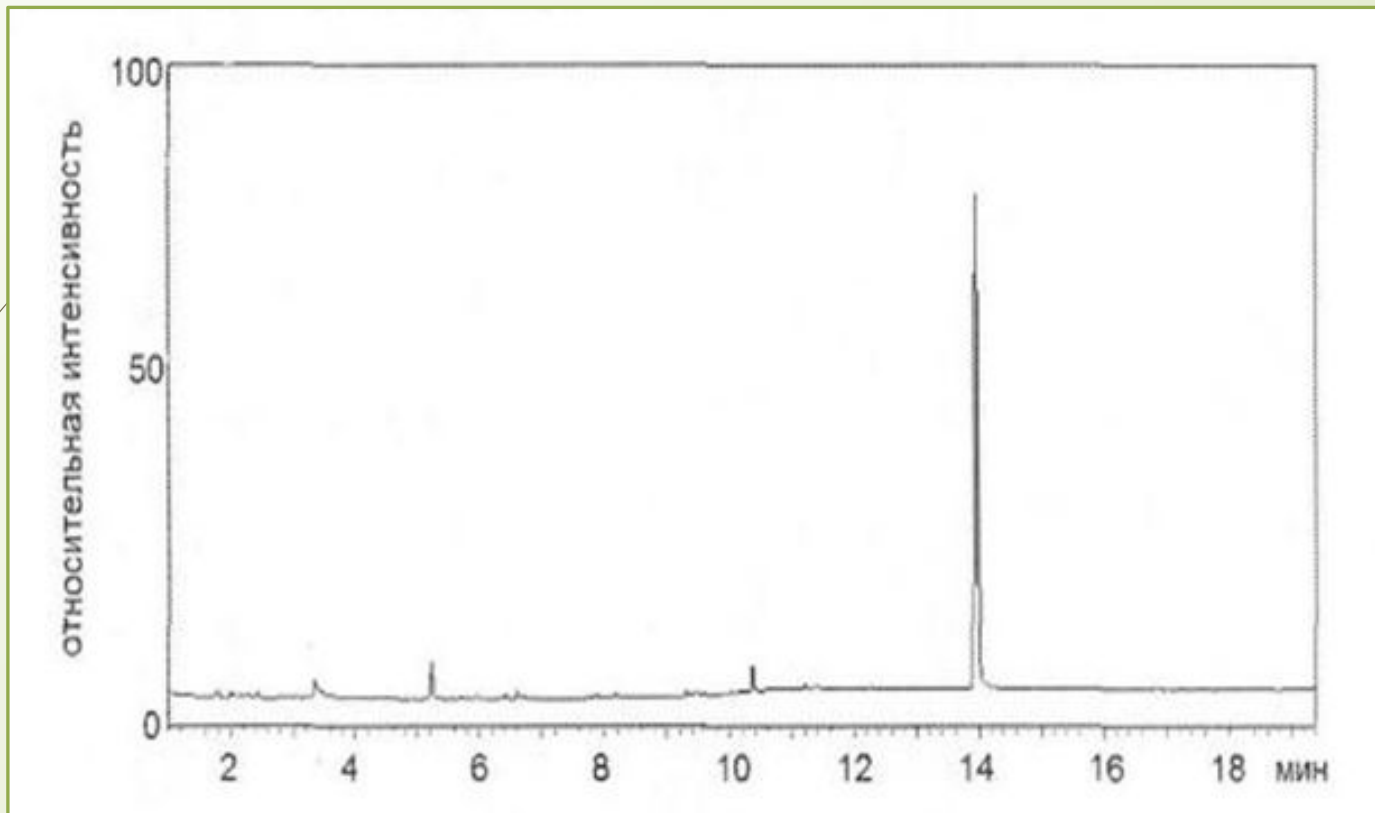
На основании проведенных химических и биологических исследований сделан вывод о том, что вещества РВ-22 и РВ-22F являются аналогами наркотического средства JWH-018 [(нафталин-1-ил)(1-пентил-1H-индол-3-ил)метанон], включенного в Список I «Список наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров, 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



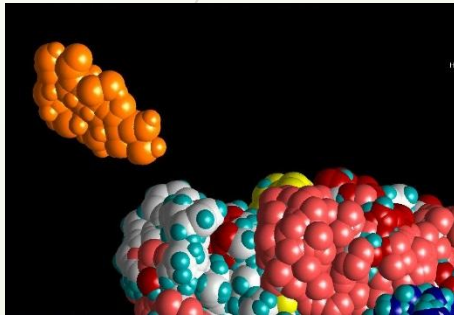
Скрининг и определение некоторых НСПВ природного и синтетического происхождения в растительных объектах и образцах криминалистической экспертизы методами ВЭЖХ-МС/МС и ГХ-МС



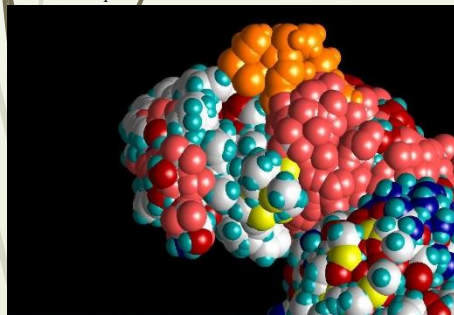
Хроматограмма экстракта курительной смеси по полному ионному току (ТIC)

## Прогнозирование и молекулярное моделирование

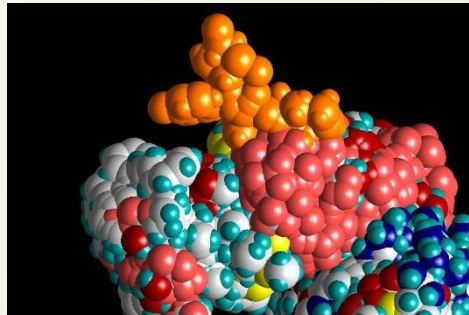
Молекула доксициклина  
нет связи с  $CB_1$  рецептором



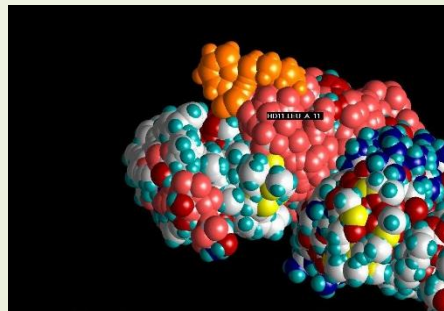
Молекула РВ 22 агонист  
имеет высокую афинность  
с  $CB_1$  рецептором



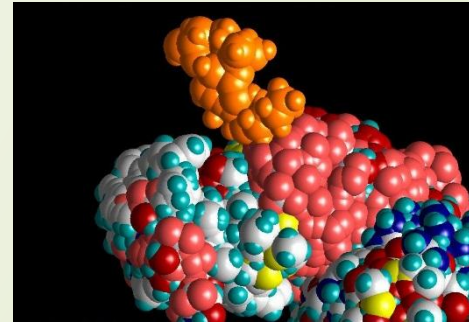
Молекула римонабант антагонист  
имеет высокую афинность  
с  $CB_1$  рецептором



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



Молекула  $\Delta^9$ -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