

## Установление закономерностей масс-спектроскопической фрагментации ряда классов психоактивных соединений в условиях ионизации электронами

Щерб Е.С.<sup>1</sup>, Неверо А. С.<sup>2</sup>, Поляков Ю.С.<sup>3</sup>, Юрченко Р.А.<sup>1</sup>, Винарский В.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, Минск

<sup>2</sup>Государственный комитет судебных экспертиз РБ, Минск

<sup>3</sup>Учреждение образования ГИПК и ТО РБ, г. Минск

Одной из глобальных проблем человечества на сегодняшний день является широкое и повсеместное распространение наркотических средств. В настоящее время наблюдается замещение «классических наркотиков» так называемыми «дизайн-наркотиками», которые в своем большинстве получают на основе определенных базовых структур и обладают таким же психоактивным действием. Анализ таких соединений проводится в основном с использованием хромато-масс-спектрометрии, в результате чего эксперты получают масс-спектры содержащихся в объекте соединений. Обновление библиотек масс-спектров в настоящее время отстает от появления новых веществ. В свою очередь это требует от экспертов расшифровки спектральной информации “вручную”.

В этой связи актуальным является подготовка методического пособия, которое помогало бы экспертам в установлении природы анализируемого объекта, так как в настоящее время не существует полностью автоматизированных программ, способных выполнять поставленную перед экспертом задачу предварительной идентификации структуры.

Целью настоящей работы было изучение закономерностей фрагментации некоторых классов психоактивных соединений (фенилалкиламинов, синтетических каннабиноидов и бензодиазепинов), с выработкой методических рекомендаций. Выбор данных классов обусловлен наибольшей распространенностью и социальной опасностью на рынке психоактивных соединений.

Масс-спектры наркотических и психоактивных веществ представляют собой набор пиков, среди которых можно выявить характеристические, наличие которых на спектре будет указывать на принадлежность анализируемого вещества к тому или иному классу.

Для фенилалкиламинов характерны низкие значения чисел  $m/z$ , небольшое количество осколочных ионов и присутствие малоинтенсивного пика молекулярного иона. Также можно отметить, что наличие заместителей в бензольном кольце приводит к изменению характера фрагментации: появление и дальнейшее увеличение числа заместителей в бензольном кольце приводит к увеличению приоритетности разрыва связи между фенилом и  $\beta$ -углеродным атомом алкильной цепи (за исключением наличия циклического заместителя). Кроме того наличие сложных заместителей в бензольном кольце приводит к появлению дополнительных пиков, связанных с фрагментацией по самому заместителю. Заместители в алкильной цепи, а также заместители по атому азота не приводят к появлению дополнительных пиков. К интенсивным пикам относятся следующие осколки молекулы: 1) бензил + заместители = 91 + заместители; 2) метиламин+заместители = 30 + заместители; 3) фенил + заместители = 77 + заместители; 4) этиламин + заместители = 44 + заместители; 5) бензил = 91; 6) фенил = 77.