



“Application of advanced mass spectrometric techniques for the identification, metabolic characterisation and toxicological analysis of new psychoactive substances”

Autor: **David Fabregat Safont**

Directores: María Ibáñez Martínez y Juan Vicente Sancho Llopis
Universitat Jaume I, Castelló de la Plana, España.

Universitat Jaume I, 27 de noviembre de 2020

Resumen:

En esta Tesis Doctoral se ha realizado una investigación en profundidad sobre las nuevas sustancias psicoactivas (NPS) desde el punto de vista de la química analítica, disciplina presente en los análisis toxicológicos y forenses. La utilidad de la química analítica especializada, basada en la espectrometría de masas para la investigación de las NPS, ha quedado demostrada a través de los diferentes estudios que se describen a continuación.

El primer bloque de la Tesis está compuesto por seis artículos de investigación divididos en dos capítulos. En el primer capítulo, se presenta la caracterización analítica completa de cuatro nuevas NPS no reportada anteriormente. El segundo capítulo de este bloque incluye dos artículos de investigación, en los que se exploran todas las capacidades del detector de masas de triple cuadrupolo para realizar la identificación de compuestos, utilizando los modos de adquisición *precursor ion scan* y *neutral loss scan*, así como la adquisición de tipo *data-dependent* para identificar los compuestos en base a su fragmentación. En este estudio también se utilizó una sonda para el análisis directo de sólidos modificada para poder determinar trazas de NPS en superficies, por ejemplo, los dedos de un potencial consumidor.

El segundo bloque de la Tesis, formado por dos capítulos con dos artículos de investigación cada uno, explora la aplicabilidad de diferentes modelos *in vitro* e *in vivo* para evaluar la farmacología de las NPS. El primer capítulo de este bloque se centra en los modelos *in vitro*, e incluye los estudios de metabolismo y potencia de los cannabinoides 5F-APP-PICA y AMB-FUBINACA, mientras que el segundo estudio de este capítulo muestra la elucidación de los metabolitos de cuatro estimulantes sintéticos, incluida la catinona sintética 5-PPDi. El quinto capítulo de la tesis, y la segunda parte de este bloque, evalúa la farmacología de las NPS utilizando modelos *in vivo*, estudiando el metabolismo y farmacocinética de la triptamina 5-MeO-MiPT, y un segundo trabajo explorando la relación entre la estructura de las catinonas sintéticas y su permeabilidad a través de la barrera hematoencefálica.

El tercer bloque está formado por el sexto capítulo, que incluye dos artículos científicos. Ambos se basan en la aplicación de estrategias de tipo *suspect screening* mediante espectrometría de masas de alta resolución, para la determinación del consumo de cannabinoides sintéticos entre adolescentes. Los resultados mostraron que algunos adolescentes participantes del estudio consumen *herbal blends* a fin de evitar que se detectara el consumo sustancias mediante los análisis de drogas rutinarios, así como la variación en la disponibilidad de NPS en base a la legislación vigente.