

# DÉVELOPPEMENT D'UNE PLATEFORME ANALYTIQUE AVANCÉE POUR TRAQUER LES NOUVELLES SUBSTANCES PSYCHOACTIVES

**anr** ©  
agence nationale de la recherche



Appel : AAPG

Année : 2018

Instrument : PRC

Contact : jonathan.farjon@univ-nantes.fr

COORDINATEUR : Dr. Jonathan FARJON

PARTENAIRES : Laboratoires de Police Scientifique (Lyon) et CEISAM (Nantes)

## RESUME

Les Nouvelles Substances Psychoactives (NSP) sont des drogues récréatives qui menacent de plus en plus la santé des Européens. Pour réévaluer et ensuite interdire les NSP, il est essentiel de les caractériser précisément grâce à la mise en œuvre d'une plateforme analytique intégrée dont la Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) transportable est le cœur.

## CONTEXTE ET OBJECTIFS

Les NSP sont des drogues, soit légales détournées de leur utilisation initiale et mal dosées, soit illégales car modifiées chimiquement. Elles sont consommées lors d'événements festifs et représentent un danger grandissant pour la santé publique en Europe [1,2]. Les NSP peuvent être vendues dans la rue ou achetées sur le *darknet*. Elles conduisent à des intoxications et la mort après overdoses.

Afin de réglementer en temps réel les NSP, il est essentiel de les caractériser pour les interdire, notamment celles qui ont une structure proche de composés légaux.

Pour déterminer sans ambiguïté la structure des NSP saisies par la Police, nous avons choisi la RMN qui est reconnue comme une technique d'analyse puissante en forensique. En particulier, la RMN à bas champ magnétique [3] est moins coûteuse et plus compacte et accessible que la RMN à haut champ magnétique mais est associée à une perte de sensibilité et de résolution des spectres.

Afin de dépasser ces limites, nous avons eu comme objectif de développer une stratégie analytique (Fig. 1) mettant en œuvre des techniques RMN avancées combinées avec d'autres analyses utilisées par la Police ainsi que le potentiel des Bases De Données (BDD) pour l'identification et l'assistance à l'élucidation des NSP.



Fig. 1

## MÉTHODOLOGIE ET RÉSULTATS

Une nouvelle plateforme d'analyse unique pour reconnaître et assister l'élucidation des NSP combine :

- Un ensemble d'expériences RMN optimisées pour détecter les  $^{19}\text{F}$ , les  $^1\text{H}$  et corrélations  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  (HSQC)
- Des techniques complémentaires : IR et CG-SM
- Un logiciel ACD/Labs [4] capable de :  
A) Gérer une BDD intégrant les spectres RMN, IR et CG-SM de 60 NSP  
B) Prédire les spectres de n'importe quelle NSP.

Cette plateforme intégrée a été validée sur 6 composés inconnus issus de saisies et d'achats rassemblant des composés purs et en mélanges dont 1 cas d'étude est présenté en Fig. 2 :

- 1) Y-a-t-il un fluor ? NON, confirme la RMN
- 2) Le(s) composé(s) sont-il(s) dans la BDD ? NON
- 3) Des composés proches structurellement sont-ils dans la BDD ? OUI : O-PCE validé par RMN 1D  $^1\text{H}$  qui montre une intégration de 4H, en faveur d'une disubstitution du cycle Ph, avec un bon Indice de Qualité de Comparaison (IQC) entre les données à caractériser et celles de la BDD.
- 4) Que dit l'IR ? O-PCE comme la RMN  $^1\text{H}$  mais avec 1 Cl
- 5) 3 isomères sont possibles : en ortho, méta ou para ? La prédiction de la 2D HSQC confirme en ortho : **NEK**

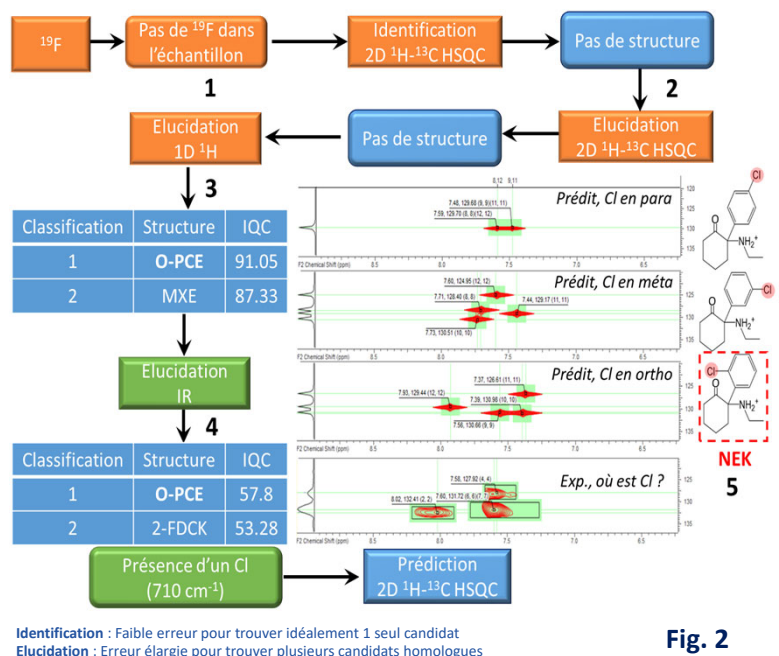


Fig. 2

## CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

- Nouvelle approche intégrée pour révéler les NSP
- Valorisation par 1 article en préparation
- Présentations orales aux congrès ENFSI, GERM et ENC 2021
- > Continuer à tester et améliorer la base de données
- > Enrichir les méthodes RMN pour les mélanges complexes

## REFERENCES

- [1] European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction 2015. New Psychoactive Substances in Europe: An Update from the EU Early Warning System; Publications Office of the European Union: Luxembourg, 2015.
- [2] Reniero, F.; Chassaing, H.; Holland, M.; Tirendi, S.; Kolar, K.; Guillou, C. Report on Characterisation of New Psychoactive Substances (NPS). 2014.
- [3] Castaing-Cordier, T.; Ladroue, V.; Besacier, F.; Bulete, A.; Jacquemin, D.; Giraudeau, P.; Farjon, J. High-field and benchtop NMR spectroscopy for the characterization of new psychoactive substances. 2021. *Foren. Sci. Int.* 321, 110718.
- [4] ACD/Labs : <https://www.acdlabs.com/>

## LOGOS PARTENAIRES



## REMERCIEMENTS

Thomas Castaing-Cordier remercie l'ANR pour le financement de sa thèse de doctorat. Alejandra Benavides Restrepo remercie l'ANR pour avoir financé son stage de 6 mois au CEISAM de Nantes en 2021. Sandrine Bouchet est remerciée pour son assistance permanente à J. Farjon.