
Développement d'une plateforme analytique intégrée basée sur la RMN mobile pour la caractérisation des drogues

Thomas Castaing-Cordier^{*1}, Virginie Ladroue², Audrey Bulete², Fabrice Besacier², Denis Jacquemin¹, Patrick Giraudeau¹, and Jonathan Farjon¹

¹Chimie Et Interdisciplinarité : Synthèse, Analyse, Modélisation (CEISAM) – Université de Nantes, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR6230 – UFR des Sciences et des Techniques - 2 rue de la Houssinière BP 92208 - 44322 NANTES Cedex 3, France

²Institut National de Police Scientifique (INPS) – Ministère de l'Intérieur – 31 Avenue Franklin Roosevelt, 69130 Écully, France

Résumé

Les nouvelles substances psychoactives (NSPs) sont des drogues non-réglées qui constituent une menace croissante en termes de santé publique [1]. Les NSPs sont des drogues couramment consommées lors d'événements festifs et peuvent entraîner la mort par overdose. Pour les réglementer en temps réel, il est essentiel de les caractériser à l'aide d'une approche rapide et accessible. Dans ce cadre, les techniques analytiques comme la spectroscopie RMN sont utiles car elles fournissent la structure moléculaire de telles drogues. Cependant, la RMN nécessite des équipements lourds, des coûts d'achat et de maintenance élevés. Au cours des dernières années, de nouveaux instruments compacts, bon marché, et ne nécessitant pas de fluides cryogéniques ont vu le jour [2]. Cependant, la "RMN de paille" est limitée par sa faible résolution spectrale et sa sensibilité réduite. Pour améliorer les performances de ces instruments compacts, nous avons récemment mis en œuvre des techniques avancées sur un spectromètre à 1 T équipé d'une bobine de gradients, telles que la suppression du signal du solvant, les expériences *pure-shift* et les méthodes 2D ultrarapides [3].

Dans ce contexte, une investigation préliminaire avec deux NSPs modèles (2-FDCK et 3-MMC) nous a permis de déterminer les techniques de RMN les plus adéquates pour leur caractérisation. Différentes séquences hétéronucléaires 2D 1H-13C ont été comparées en termes de sensibilité et de dispersion du signal pour identifier les NSPs à 60 MHz. Des outils supplémentaires sont nécessaires pour faire face à la fois à la complexité des structures moléculaires et au fait que les composés saisis sont souvent en mélange. Dans cette optique, nous explorons la combinaison de la RMN 1D et 2D avec des outils de reconnaissance spectrale comme les bases de données expérimentales ou la détermination des déplacements chimiques par la DFT. À terme, ces approches contribueront à la création d'une plateforme intégrée pour identifier, élucider et profiler les NSPs. Cette plateforme ouvre la voie à la caractérisation des drogues présentant un intérêt majeur pour les douanes et les laboratoires de forensique et de la police scientifique.

Références :

*Intervenant

Reniero F., *et al.* (2014). Report on Characterisation of New Psychoactive Substances (NPS).

Kuster S.K., *et al.* (2011) *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 13,13172-13176.

Gouilleux B., *et al.* (2020) *J. Magn. Reson.*, 106810.