

# LIBRO DE RESÚMENES

V Workshop Grupo SolinDrugs

## Drogas en la Sociedad 4.0

12-13 de diciembre de 2024

Salón de Actos. Biblioteca de Ciencias Eduard Boscà.  
Presencial y on-line



## Grupo SolinDrugs

Departamento de Química Analítica, Universitat de València

Edificio "Jeroni Muñoz". C/ Dr. Moliner 50, 46100-Burjassot, Valencia



@Solindrugs



solindrugs@uv.es



www.uv.es/solindrugs



Proyecto **2022I030**

## PROGRAMA CIENTÍFICO-TÉCNICO

Jueves, 12 de diciembre de 2024 (**Sesión 1**)

15:50	<p><b>Apertura</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● <b>Salvador Garrigues Mateo</b> (Universitat de València)</li> <li>● <b>Rafael Ibañez Puchades</b> (Decano Facultat de Química. Universitat de València)</li> <li>● <b>Miguel Ángel Aragón Dolz</b> (Director del Área Funcional de Sanidad y Política Social, Delegación del Gobierno en la CV)</li> <li>● <b>José Rodríguez Jurado</b> (Subdelegado del Gobierno en Valencia)</li> </ul>
16:00	<p><b>Enfoques legislativos en la regulación de nuevas sustancias psicoactivas</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● <b>Clara Pérez Alfonso</b>, Laboratorio Oficial de Control de Drogas de Valencia. Área de Sanidad. Subdelegación del Gobierno en Valencia</li> </ul>
16:30	<p><b>Metodologías sostenibles para el análisis de sustancias psicoactivas en fluidos biológicos</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● <b>Daniel Gallart Mateu</b>, Universitat de València</li> </ul>
17:00	<p><b>Sesión de pósteres - Coffee break</b></p>
17:30	<p><b>Evaluación del consumo de sustancias adictivas en diferentes épocas del año en la Comunidad de Madrid mediante el análisis de aguas residuales</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● <b>Emma Gracia Lor</b>, Universidad Complutense de Madrid</li> </ul>
18:00	<p><b>Determinación de sustancias psicoactivas en aguas residuales</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● <b>Miguel Muñoz Bartual</b>, Universitat de València</li> </ul>
18:30	<p><b>Mesa redonda</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● Moderador: <b>Salvador Garrigues Mateo</b>, Universitat de València</li> </ul>

## Viernes, 13 de diciembre de 2024 (Sesión 2)

9:30	<b>Hábitos saludables y gestión del estrés</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>● <i>Nuria Mateo Paredes y Montserrat Piñaga Sole</i>, Universitat de València</li> </ul>
10:00	<b>Mesa redonda</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>● Moderador: <i>Salvador Garrigues Mateo</i>, Universitat de València</li> <li>● <i>Rafael Ibañez Puchades</i>, Decano Facultat de Química. Universitat de València</li> <li>● <i>M. Belén Cardona Rubert</i>, Síndica de Greuges de la Universitat de València</li> <li>● <i>Francisco Atienza González</i>, Delegado de la Rectora para la Salud Psicosocial</li> </ul>
11:00	<b>Sesión de pósteres - Coffee break</b>
11:30	<b>Nuevas sustancias psicoactivas y su análisis no-dirigido mediante espectrometría de masas de alta resolución. Detección a través de la predicción de perfiles de fragmentación. Aplicación a catinonas y otras sustancias de extrema vigilancia</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>● <i>José Manuel Matey Cabañas</i>, Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses</li> </ul>
12:00	<b>La importancia de las muestras biológicas en la Toxicología Forense</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>● <i>Pamela Cabarcos Fernández</i>, Universidad de Santiago de Compostela</li> </ul>
12:30	<b>Presentaciones flash sesión de pósteres</b>
13:00	<b>Clausura</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>● <i>Salvador Garrigues</i>, Universitat de València</li> </ul>

## **COMITÉ ORGANIZADOR Y CIENTÍFICO**

### Grupo SolinDrugs

Departamento de Química Analítica, Universitat de València

Edificio “Jeroni Muñoz”, C/ Dr. Moliner 50, 46100-Burjassot, Valencia

- Salvador Garrigues Mateo (Catedrático)
- Francesc A. Esteve Turrillas (Profesor Titular)
- Olga Pardo Marín (Profesora Titular)
- David Pérez Guaita (Investigador Ramón y Cajal)
- Daniel Gallart Mateu (Investigador Postdoctoral)

**Laboratorio Oficial de Control de Drogas de Valencia.** Área de Sanidad.  
Subdelegación del Gobierno en Valencia.

- Clara Pérez Alfonso (Jefa de Sección)



[www.uv.es/solindrugs](http://www.uv.es/solindrugs)

## **ÍNDICE DE PONENCIAS ORALES**

	Página
<b>O-1 Enfoques legislativos en la regulación de nuevas sustancias psicoactivas</b> <i>Clara Pérez Alfonso</i>	7
<b>O-2 Metodologías sostenibles para el análisis de sustancias psicoactivas en fluidos biológicos</b> <i>Daniel Gallart Mateu</i>	10
<b>O-3 Evaluación del consumo de sustancias adictivas en diferentes épocas del año en la Comunidad de Madrid mediante el análisis de aguas residuales</b> <i>Emma Gracia Lor</i>	12
<b>O-4 Determinación de sustancias psicoactivas en aguas residuales</b> <i>Miguel Muñoz Bartual</i>	14
<b>O-5 Hábitos saludables y gestión del estrés</b> <i>Nuria Mateo Paredes y Montserrat Piñaga Solé</i>	16
<b>O-6 Nuevas sustancias psicoactivas y su análisis no-dirigido mediante espectrometría de masas de alta resolución. Detección a través de la predicción de perfiles de fragmentación. Aplicación a catinonas y otras sustancias de extrema vigilancia</b> <i>José Manuel Matey Cabañas</i>	17
<b>O-7 La importancia de las muestras biológicas en la Toxicología Forense</b> <i>Pamela Cabarcos Fernández</i>	20

## ÍNDICE DE PÓSTERES

	Página
<b>P-1 Development of fluorimetric chemosensor for GBL detection in oral fluids</b>	23
<i>Jordi Roig-Rubio, Carlos Herrera, José A. Sáez, Salvador Gil, Pablo Gaviña</i>	
<b>P-2 Determinación de catinonas sintéticas en fluidos biológicos mediante polímeros de impronta molecular y cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas</b>	25
<i>Miguel Muñoz Bartual, Paloma Arjona Mudarra, Francesc A. Esteve Turrillas, Salvador Garrigues Mateo</i>	
<b>P-3 Análisis de aguas residuales para establecer relaciones entre consumo de drogas y psicofármacos y factores sociales</b>	27
<i>Patricia García-Atienza, Ángela Reig, Ángel Morales-Rubio, Sergio Armenta</i>	
<b>P-4 Establishment of a procedure for the identification of metabolites derived from synthetic cathinones</b>	29
<i>Maria Garrigues Ruiz, David Pérez-Guaita, Guillermo Quintás, Francesc A. Esteve Turrillas</i>	
<b>P-5 Cannabinoides en alimentos de cáñamo: desarrollo de un método analítico para garantizar su seguridad alimentaria</b>	31
<i>Alejandro García-Juan, María Pérez-Cerezo, Sergio Armenta, Olga Pardo</i>	

# **RESUMEN DE PONENCIAS ORALES**

**PONENCIA O-1****ENFOQUES LEGISLATIVOS EN LA REGULACIÓN DE NUEVAS SUSTANCIAS  
PSICOACTIVAS**Clara Pérez-Alfonso <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratorio Oficial de Control de Drogas de Valencia. Área de Sanidad.  
Subdelegación del Gobierno en Valencia.

e-mail: [clara.perez@correo.gob.es](mailto:clara.perez@correo.gob.es)

El marco jurídico internacional de control de drogas está formado por la Convención Única de 1961 sobre Estupefacientes, modificada por el Protocolo de 1972, el Convenio sobre Sustancias Psicotrópicas de 1971 y la Convención de las Naciones Unidas contra el Tráfico Ilícito de Estupefacientes y Sustancias Psicotrópicas de 1988 [1,2,3,4].

La adhesión a los tratados supone adoptar medidas encaminadas a vigilar la producción y comercio legal de estupefacientes, sustancias psicotrópicas y precursores químicos; garantizar la disponibilidad para fines médicos y científicos; hacer frente al tráfico; así como prevenir el consumo de drogas y procurar la identificación, tratamiento, educación, postratamiento y reinserción social de las personas afectadas por el consumo de estas sustancias [1].

Como cabe esperar, para poder someter a fiscalización una Nueva Sustancia Psicoactiva (NPS), primero debe ser detectada; en este proceso resulta también imprescindible disponer de redes de intercambio de información como la EWA (*Early Warning Advisory on New Psychoactive Substances*) de UNODC (*United Nations Office On Drugs and Crime*), que recopila información y proporciona conocimientos a la comunidad internacional sobre NPS. El Tox-Portal de la EWA recopila información toxicológica; todo ello contribuye a la priorización de las sustancias en el proceso de fiscalización internacional [6].

Una vez se ha identificado una nueva sustancia, es imprescindible su examen médico y científico. En virtud de los convenios de fiscalización de sustancias estupefacientes y

psicótropas, esta misión está encomendada al Comité de Expertos en Farmacodependencia de la OMS, cuyas recomendaciones se basan en las mejores pruebas científicas, médicas y de salud pública disponibles. En función del resultado de la evaluación, el Comité puede aconsejar la fiscalización de la sustancia [2,3,7,8].

La adhesión a los tratados de fiscalización no impide que los estados parte adopten medidas más restrictivas o legislaciones nacionales complementarias. En este sentido, los diferentes países han aplicado una serie de enfoques jurídicos que van desde la inclusión caso por caso, hasta la fiscalización de grupos genéricos de sustancias, pasando por los procedimientos rápidos y las prohibiciones temporales [9].

En las políticas de regulación de las NPS, el Observatorio Europeo de las Drogas y las Toxicomanías (OEDT) ha identificado una serie de retos principales: -cuando se descubre una nueva sustancia el conocimiento de los riesgos que supone para la salud son todavía muy limitados; -actualizar la legislación lleva tiempo y la aparición de NPS es un fenómeno muy rápido; las legislaciones nacionales son diferentes entre países, lo cual dificulta la cooperación judicial; -emplear definiciones demasiado amplias que abarquen gran número de sustancias puede dificultar el proceso;-los países no siempre disponen de los recursos técnicos y financieros necesarios para controlar la aparición de NPS [10,11].

Los controles legales han contribuido a frenar la aparición de nuevos derivados de algunos tipos de drogas; sobre todos las que han sido objeto de controles específicos como el fentanilo. No obstante, siguen apareciendo nuevas sustancias diseñadas para eludir dichos controles, siendo China e India los principales países de origen [12]. Esto demuestra que el control legal por sí solo no frena este mercado. Las políticas de control, que actúan sobre la oferta, deben ir asociadas al despliegue de políticas más contundentes que actúen sobre la demanda, como campañas de prevención, reinserción y otras medidas; tal como está previsto en los tratados de fiscalización internacional.

**Referencias:**

- [1] *International Narcotics Control Board. Report 2023 E/INCB/2023/1 (2023).*
- [2] <https://www.incb.org/incb/en/narcotic-drugs/index.html>.
- [3] <https://www.incb.org/incb/en/psychotropics/index.html>.
- [4] <https://www.incb.org/incb/en/precursors/index.html>.
- [5] <https://www.who.int/groups/ecdd/about-us>.
- [6] *UNODC Early Warning Advisory on the New Psychoactive Substances* (<https://www.unodc.org/LSS/Home/NPS>).
- [7] <https://www.who.int/groups/who-expert-committee-on-drug-dependence/about>.
- [8] *United Nations Office on Drugs and Crime. Scheduling procedures under the international drug control conventions. UN, Vienna, 2020.*
- [9] *UNODC Early Warning Advisory on the New Psychoactive Substances. Legal Responses.* <https://www.unodc.org/LSS/Page/NPS/LegalResponses>.
- [10] *European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction. Perspectives on Drugs. Legal Approaches to controlling New Psychoactive Substances. UN, Vienna, 2016.*
- [11] *European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction and Eurojust, New Psychoactive Substances in Europe. Legislation and prosecution — current challenges and solutions. Publications Office of the European Union, Luxembourg, 2016.*
- [12] *European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction. European Drug Report 2024.* [https://www.emcdda.europa.eu/publications/european-drug-report/2024\\_en](https://www.emcdda.europa.eu/publications/european-drug-report/2024_en).

**PONENCIA O-2****METODOLOGÍAS SOSTENIBLES PARA EL ANÁLISIS DE SUSTANCIAS****PSICOACTIVAS EN FLUIDOS BIOLÓGICOS**

Daniel Gallart Mateu<sup>a</sup>, Miguel Muñoz-Bartual

<sup>a</sup> Departamento de Química Analítica, Dr. Moliner 50, 46100 Burjassot (Valencia)

e-mail: [daniel.gallart@uv.es](mailto:daniel.gallart@uv.es)

En los últimos años, se han desarrollado muchos enfoques de microextracción como alternativa a las metodologías clásicas, debido a su menor consumo de muestra, solventes y reactivos, menor generación de residuos y, en algunos casos, fácil automatización. Por lo tanto, también reduciendo el impacto ambiental y el riesgo para los operadores. En las últimas décadas, se ha desarrollado un amplio portafolio de enfoques de microextracción, entre ellos el empleo de líquidos eutécticos (DES), líquidos iónicos (IL) o el desarrollo de materiales inteligentes como el caso de polímeros de impronta molecular (MIPs) o armazones metal-orgánicos (MOFs). Dichos enfoques, como puede ser el caso de los MIPs se han empleado de forma frecuente en diversos campos, como es el caso de las ciencias forenses. No obstante, en muchos de los casos, cuando se habla de sostenibilidad en este tipo de enfoques de microextracción, se tiene en cuenta el proceso analítico global, pero no se hace prácticamente referencia a la sostenibilidad asociada a la producción o síntesis de este tipo de materiales. En este sentido, cuando se aborda el caso de la síntesis de MIPs, se observa que algunos de los reactivos utilizados pueden tener un impacto en la salud y el medio ambiente. Por ello, en la actualidad se están introduciendo e investigando una nueva generación de reactivos prometedores, como los solventes eutécticos profundos naturales (NADESs), como sustitutos de los reactivos tradicionalmente empleados en la síntesis de los polímeros de impronta molecular. Siguiendo esta idea, se presenta el desarrollo de fases estacionarias de impresión molecular (MIPs) basadas en el empleo de solventes eutécticos profundos naturales (NADES), como monómeros funcionales, empleados como extracción en fase sólida (SPE) de sustancias

psicoactivas, en concreto, clorometcatinona (CMC) en fluidos biológicos y aguas fluviales para su posterior determinación mediante espectrometría de movilidad iónica (IMS). En este estudio, se determinó el efecto de diferentes porcentajes de NADES en la síntesis de los MIPs sobre su eficiencia de extracción, evaluando la influencia del pH de la muestra, el tipo de solvente de lavado y el solvente de elución. Su empleo ha permitido el análisis de este tipo de muestras alcanzando límites de cuantificación entre 0.7 y 1.7  $\mu\text{gL}^{-1}$ . El estudio también revela que los NADES seleccionados mostraron buena estabilidad química, lo que los hace adecuados para aplicaciones repetidas, evaluándose también la sostenibilidad de la metodología a la hora de su aplicación a estos tipos de matrices complejas.

**Agradecimientos:**

Delegación del Gobierno para el Plan Nacional sobre Drogas, **Proyecto 2022I030**.

**PONENCIA O-3****EVALUACIÓN DEL CONSUMO DE SUSTANCIAS ADICTIVAS EN DIFERENTES ÉPOCAS DEL AÑO EN LA COMUNIDAD DE MADRID MEDIANTE EL ANÁLISIS DE AGUAS RESIDUALES**

Emma Gracia-Lor<sup>a</sup>, Natalia Melones-Peña<sup>a</sup>, Azara Pérez-Valenciano<sup>b</sup>,

Susana Torrado-del Rey<sup>b</sup>, María Justina Martín-Gutiérrez<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avenida Complutense s/n, 28040, Madrid

<sup>b</sup> Laboratorio de Salud Pública de Madrid, Subdirección General de Salud Pública. Madrid Salud. Ayuntamiento de Madrid. Calle Emigrantes 20. 28043 Madrid

e-mail: [emgracia@ucm.es](mailto:emgracia@ucm.es)

El consumo de drogas ilegales, así como el de benzodiazepinas, con o sin receta médica, se ha incrementado considerablemente en los últimos años en España. Su consumo continuado genera adicción, convirtiéndose en un problema que perjudica tanto al consumidor como a la sociedad. Por ello, es necesario disponer de datos precisos y actualizados sobre su uso.

En este trabajo se ha aplicado la metodología de análisis de aguas residuales para ampliar la información existente sobre los hábitos de consumo de la población de la Comunidad de Madrid. En concreto, se ha llevado a cabo un estudio del consumo de una veintena de sustancias adictivas, incluyendo drogas ilegales, nuevas sustancias adictivas y benzodiazepinas. Las muestras se tomaron en ocho estaciones depuradoras de aguas residuales (EDAR) en tres épocas distintas: diciembre 2023, abril y junio 2024 (168 muestras en total). De este modo, además de poder evaluar si el consumo de las sustancias investigadas varía de una población a otra, también se ha investigado si varía en función de la época del año. Su análisis se ha llevado a cabo utilizando un método analítico optimizado basado en una etapa de tratamiento de la muestra mediante extracción en fase sólida seguida de la determinación por HPLC-MS/MS (Gracia-Lor et al., 2024). Nuestros datos reflejan que, en la Comunidad de Madrid, el cannabis y la cocaína son, con diferencia, las sustancias ilegales más consumidas, al

igual que ocurre a nivel nacional (Observatorio Español de las Drogas y las Adicciones (OEDA), 2024). En cuanto a las benzodiazepinas, dos de ellas (lorazepam y lormetazepam) estaban presentes en todas las muestras analizadas. En relación con las diferencias de consumo observadas entre las poblaciones investigadas, el análisis estadístico realizado indica que no se deben a factores sociodemográficos o socioeconómicos sino a los hábitos de consumo de la población de cada núcleo urbano. Por otro lado, el consumo de las sustancias investigadas no varía de manera significativa en función de la época del año, a excepción de algunas sustancias como la codeína cuyo uso, en algunas poblaciones, fue un poco más elevado en diciembre de 2023; esta variación podría deberse a uso legal como medicamento para reducir la tos asociada a procesos catarrales, mucho más frecuentes en invierno.

**Agradecimientos:**

Madrid Salud y Delegación del Gobierno para el Plan Nacional sobre Drogas, financiado por la Unión Europea – NextGeneration EU (**EXP2022/008817**).

**Bibliografía:**

Gracia-Lor, E., Pérez-Valenciano, A., De Oro-Carretero, P., Ramírez-García, L., Sanz-Landaluze, J., Martín-Gutiérrez, M.J., 2024. Consumption of illicit drugs and benzodiazepines in six Spanish cities during different periods of the COVID-19 pandemic. *Sci. Total Environ.* 935. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.173356>

Observatorio Español de las Drogas y las Adicciones (OEDA), 2024. Informe 2024. Alcohol, tabaco y drogas ilegales en España. Minist. Sanidad. Deleg. del Gob. para el Plan Nac. sobre Drog. 294.

**PONENCIA O-4****DETERMINACIÓN DE SUSTANCIAS PSICOACTIVAS EN AGUAS RESIDUALES**

Miguel Muñoz Bartual, Francesc A. Esteve-Turrillas, Salvador Garrigues Mateo

<sup>a</sup> Departamento de Química Analítica, Universitat de València.

Edificio "Jeroni Muñoz". C/ Dr. Moliner 50, 46100-Burjassot, Valencia

e-mail: [miguel.munoz-bartual@uv.es](mailto:miguel.munoz-bartual@uv.es)

La amplia popularidad de las drogas ilícitas en la sociedad y el uso indebido de medicamentos, principalmente recetados para el tratamiento de enfermedades mentales, ha evidenciado la necesidad de recopilar información sobre las tendencias de consumo para implementar campañas de prevención y/o desarrollar intervenciones efectivas [1]. En este sentido, la monitorización de aguas residuales se ha consolidado como una herramienta eficaz para identificar patrones de consumo y relacionarlos con la incidencia de problemas de salud mental en grupos poblacionales específicos. No obstante, la monitorización de aguas residuales presenta varios desafíos metodológicos, siendo la correcta toma de muestras un paso crítico en el proceso. La elección de un modo y frecuencia de muestreo adecuados es fundamental para garantizar la precisión, fiabilidad y representatividad de los datos, así como su extrapolación a la comunidad estudiada [2]. Los métodos comunes de toma de muestras representativas implican el uso de dispositivos automáticos de muestreo de gran tamaño y elevado coste, requiriéndose generalmente la toma de una muestra correspondiente a un periodo de 24 horas. Por ello, existe la necesidad de desarrollar dispositivos más simples y fácilmente accesibles. En este estudio se presenta el desarrollo de un dispositivo de muestreo de bajo coste y fácil construcción, basado en el empleo de una mini bomba peristáltica controlada mediante hardware de código abierto, como alternativa a los métodos y dispositivos convencionales de muestreo de aguas residuales. Este dispositivo permite un despliegue amplio con instalación y mantenimiento sencillos, y está diseñado para adaptarse a instalaciones con espacio limitado. El diseño, la selección de componentes y los parámetros operacionales han

sido evaluados para obtener la funcionalidad requerida. El sistema propuesto fue utilizado para el muestro en tomas de alcantarillado ubicadas en diversos puntos de las instalaciones de la Universidad de Valencia (UV), con el objeto de demostrar su funcionamiento adecuado. Se recolectaron muestras compuestas, para un periodo de 8 h, de aguas residuales en diferentes días a lo largo de 2024 para obtener muestras representativas para el monitoreo de drogas ilícitas y farmacéuticas. Finalmente, se determinaron 40 sustancias psicoactivas en las muestras recogidas, empleando para el análisis un protocolo desarrollado y validado por nuestro grupo de investigación, basado en la extracción en fase sólida (SPE) y UHPLC-MS/MS, lo que ha permitido elaborar el perfil de consumo de sustancias psicoactivas en diversos centros de la UV.

#### **Agradecimientos:**

Los autores agradecen al Proyecto **PND20221030** financiado por la Delegación del Gobierno Español para el Plan Nacional sobre Drogas, por el apoyo económico.

#### **Referencias:**

- [1] A.L.N. van Nuijs, et al. *Sci. Total Environ.* 409 (2011) 3564–357
- [2] C. Ort, et al. *Environ. Sci. Technol.* 44 (2010) 6024–6035.

**PONENCIA O-5****HÁBITOS SALUDABLES Y GESTIÓN DEL ESTRÉS**

Nuria Mateo Paredes, Montserrat Piñaga Solé

Servicio de Prevención y Medio Ambiente de la Universitat de València

e-mail: [Montserrat.Pinaga@uv.es](mailto:Montserrat.Pinaga@uv.es) / [Nuria.Mateo@uv.es](mailto:Nuria.Mateo@uv.es)

El Servicio de Prevención y Medio Ambiente de la Universidad de Valencia, ha participado en un interesante proyecto centrado en el análisis de aguas residuales en esta Universidad, en el marco del Plan Nacional sobre drogas. Los resultados muestran la presencia de psicofármacos en cantidades similares a las recogidas en otros entornos. Desde nuestra perspectiva y formación, la actuación correcta es el fomento de hábitos de vida saludables y gestión del estrés, como verdaderas herramientas para sortear los problemas del día a día y alcanzar una vida plena física y emocional. Construir una vida basada en estos pilares, nos ayuda a estar mejor, sin necesitar el consumo de dichas sustancias, cuya proyección final es el daño a nuestra salud

**Agradecimientos:**

Los autores agradecen al Proyecto **PND20221030** financiado por la Delegación del Gobierno Español para el Plan Nacional sobre Drogas, por el apoyo económico.

**PONENCIA O-6****DETECCIÓN DE NUEVAS SUSTANCIAS PSICOACTIVAS PREDICIENDO SUS PERFILES DE FRAGMENTACIÓN MEDIANTE ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE ALTA RESOLUCIÓN: DEL DATO PRIMARIO AL PERIDATO Y SU APLICACIÓN A SUSTANCIAS DE EXTREMA VIGILANCIA**

Jose Manuel Matey<sup>a,b</sup>, Luis Manuel Menéndez-Quintanal<sup>c</sup>, Félix Zapata<sup>d</sup>, Sergio Velázquez-Romanos<sup>a</sup>, Gemma Montalvo<sup>b,e</sup>, Carmen García-Ruíz<sup>b,e</sup>

<sup>a</sup> Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses, Departamento de Madrid. Servicio de Química y Drogas. C/ José Echegaray nº4, 28232, Las Rozas de Madrid, Madrid, España.

<sup>b</sup> Instituto Universitario de Investigación en ciencias Policiales (IUICP). Colegio Máximo de Jesuitas. Universidad de Alcalá. Calle Libreros, 27, 28801, Alcalá de Henares, Madrid, España.

<sup>c</sup> Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses, Departamento de Tenerife. Servicio de Química y Drogas. Campus de Ciencias de la Salud. C/ La Cuesta 38320, La Laguna (Sta. Cruz de Tenerife).

<sup>d</sup> Universidad de Murcia, Departamento de Química Analítica, Facultad de Química, Campus de Espinardo, 30100, Murcia, España.

<sup>e</sup> Universidad de Alcalá, Grupo de Investigación en Ciencias Químicas y Forenses, Facultad de Ciencias, Campus, Crtra. Madrid-Barcelona km 33,6, 28871, Alcalá de Henares, Madrid, España.

e-mail: [josemanuel.matey@justicia.es](mailto:josemanuel.matey@justicia.es)

Este trabajo de investigación aplicada responde a las necesidades de la administración de justicia y del ámbito académico, con el objetivo de contribuir al servicio de la sociedad. El análisis de Nuevas Sustancias Psicoactivas (NPS), tanto en muestras de aguas residuales como en muestras de interés toxicológico y forense, permite conocer patrones y tendencias de consumo en la población, lo que a su vez permite detectar amenazas debidas a nuevas sustancias especialmente peligrosas.

El conocimiento de su prevalencia es esencial, así como también su análisis, clínico, toxicológico y forense en sus diferentes matrices toxicológicas (sangre, orina, contenido gástrico, cabello, parafernalia y material incautado).

Abordar la detección e identificación de estas nuevas sustancias mediante perfiles de fragmentación es una de las estrategias más potentes cuando la identificación por

medio de estándares y de la comparación de sus espectros con los de las muestras incautadas no es posible.

Aplicando el análisis no dirigido y aprovechando la especificidad y sensibilidad de la espectrometría de masas de alta resolución, conseguimos datos primarios de gran calidad analítica. Esta estrategia permite no solo la identificación del limitado número de NPS preseleccionadas e incluidas en los métodos dirigidos, sino también de todas aquellas NPS de las que no se dispone patrón y de sus metabolitos, incluyendo las NPS desconocidas fruto de nuevas derivaciones químicas (llevadas a cabo sobre sustancias conocidas).

Es sabido que muchas de estas NPS se sintetizan de forma clandestina mediante derivaciones químicas sistemáticas sobre una misma estructura, apareciendo y desapareciendo a medida que las NPS se van fiscalizando. Estas NPS presentan estructuras comunes y se pueden agrupar por familias químicas. Por ello, hace unos años y de forma pionera (2020), propusimos una clasificación química de NPS basada exclusivamente en su estructura química [1] que pudiera ser usada de referencia para la fiscalización [1] y análisis [2] de las NPS.

Por medio de esta clasificación, se investigaron perfiles de fragmentación basados en la bibliografía y en las librerías de espectros disponibles. La identificación de NPS y sus metabolitos se realizó mediante detección no dirigida, utilizando espectrometría de masas de alta resolución (HRMS) y detección de sus iones diagnóstico [2].

Se han establecido así perfiles de fragmentación comunes y pérdidas de neutro que dan lugar a la detección de los iones más significativos de las NPS, los cuales han sido contrastados con muestras experimentales y/o librerías espectrales, contribuyendo así a su conceptualización; pasando desde el dato primario al peridato [3]. Esta estrategia ha permitido parametrizar y automatizar estos patrones de búsqueda, e incorporarlos en los mismos métodos de rutina no dirigidos, aumentando la fiabilidad en la identificación de NPS conocidas y desconocidas. En esta presentación mostramos la aplicación directa de esta estrategia mediante software, con búsquedas algorítmicas selectivas en lenguaje SQL, que pueden aplicarse a un gran pool de muestras en un

mismo estudio, o estudios individualizados. También permite lanzar búsquedas algorítmicas centinelas sobre estos datos conceptualizados o peridatos. En este caso en concreto, se aplica a una serie de familias de NPS de especial prevalencia como son las catinonas, así como de especial peligrosidad como son los cannabinoides sintéticos y los opioides (fentanilos y nitazenos).

### **Agradecimientos:**

Al Servicio de Química y Drogas, a la Dirección, así como todo el personal del Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses (INTCF) y Ministerio de Justicia. Al Proyecto Europeo Non-Targeted Forensic Multidisciplinary Platform for Investigation of Drug-Related Fatalities NARCOSIS.

### **Bibliografía:**

- [1] Zapata, F., Matey J.M., Montalvo, G., García-Ruiz, C. Chemical classification of new psychoactive substances (NPS). *Microchem. J.* 2021, 163, 105877." <https://doi.org/10.1016/j.microc.2020.105877>
- [2] Matey J.M., Zapata F., Menéndez-Quintanal L.M., Montalvo G., García-Ruiz C. Identification of new psychoactive substances and their metabolites using non-targeted detection with high-resolution Mass Spectrometry through Diagnosing Fragment Ions/Neutral Loss Analysis. *Talanta*, Volume 265, 2023, 124816, ISSN 0039-9140, <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2023.124816>
- [3] Padoan, A., Cadamuro, J., Frans, G., Cabitza, F., Tolios, A., De Bruyne, S., van Doorn, W., Elias, J., Debeljak, Z., Perez, S. M., Özdemir, H., & Carobene, A. (2024). Data flow in clinical laboratories: could metadata and peridata bridge the gap to new AI-based applications?. *Clinical chemistry and laboratory medicine*, 10.1515/cclm-2024-0971. Advance online publication. <https://doi.org/10.1515/cclm-2024-0971>

**PONENCIA O-7****LA IMPORTANCIA DE LAS MUESTRAS BIOLÓGICAS EN LA TOXICOLOGÍA FORENSE**

Pamela Cabarcos Fernández

Instituto de Ciencias Forenses "Luís Concheiro". Servicio de Toxicología Forense. Facultad de Medicina.  
Universidad de Santiago de Compostela. C/San Francisco s/n, 15782, Santiago de Compostela

e-mail: [pamela.cabarcos@usc.es](mailto:pamela.cabarcos@usc.es)

La Toxicología Forense es el resultado de la hibridación de la Química Analítica y la Toxicología Fundamental, y tiene como objetivo dar respuesta a los procedimientos judiciales relacionados con las intoxicaciones y el consumo de sustancias psicotrópicas. El objetivo es determinar la etiología de la intoxicación, el agente causal, así como la vía de administración y la concentración de la sustancia implicada. Para ello se requiere el análisis de las muestras biológicas, siendo de especial relevancia el tipo de muestras recibidas en los laboratorios para realizar una correcta interpretación de los resultados.

En el caso de la toxicología postmortem, la sangre y la orina han sido siempre las muestras de primera elección. La sangre es una muestra idónea si se necesitan resultados cuantitativos, ya que presenta una buena correlación entre la concentración de la droga/fármaco y los efectos tóxicos. Sin embargo, la orina se utiliza habitualmente en los análisis cualitativos, debido a las altas concentraciones de las sustancias y sus metabolitos, facilitando así su detección. El contenido gástrico también puede ser una muestra útil para la identificación de los analitos cuando el tiempo tras la ingestión es corto, ya que hay mayores probabilidades de que contenga grandes cantidades de las sustancias implicadas de forma inalterada. Otras muestras como el humor vítreo, el líquido pericárdico o la bilis son de especial interés según las sustancias que se quieran determinar y la tipología de la muerte.

En las últimas décadas se ha despertado un gran interés por la realización de los análisis en las muestras alternativas, entre las que se encuentra la saliva, el meconio, el sudor

o el pelo, permitiendo esta última el establecimiento de un perfil cronológico del consumo de drogas, muy importante en los controles de deshabituación.

**Referencias:**

- Collection of biological samples in forensic toxicology. R.J. Dinis-Oliveira, F. Carvalho, J.A. Duarte, F. Remião, A. Marques, A. Santos, T. Magalhães. *Toxicology Mechanisms and Methods*, 2010, 20(7):363-414
- Forensic toxicology. F.T. Peters, H.H. Maurer, F. Musshoff. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2011, 400:7-8
- Alternative matrices in forensic toxicology: a critical review. E.G. de Campos, B. Ruiz Brandão de Costa, F. Spinetti Dos Santos, F. Monedeiro, M. Nogueira Rabelo Alvez, W.J. Ramos Santos Junior, B. Spinosa De Martinis. *Forensic Toxicology*, 2022, 40(1):1-18

# **RESUMEN DE PÓSTERES**

**PÓSTER P-1****DEVELOPMENT OF FLUORIMETRIC CHEMOSENSOR FOR  
GBL DETECTION IN ORAL FLUIDS**

Jordi Roig-Rubio,<sup>a</sup> Carlos Herrera,<sup>a</sup> José A. Sáez,<sup>a,b</sup> Salvador Gil,<sup>a,b,c</sup> and

Pablo Gaviña<sup>a,b,c</sup>

<sup>a</sup>*Instituto Interuniversitario de Investigación de Reconocimiento Molecular y Desarrollo Tecnológico (IDM), Universitat Politècnica de València, Universitat de València, Spain*

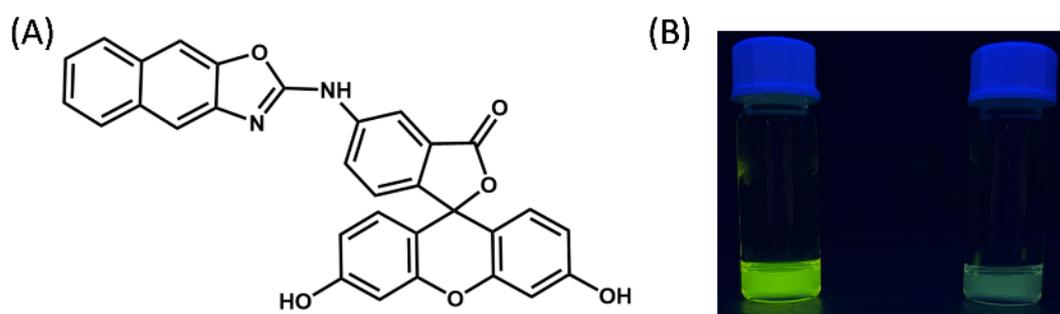
<sup>b</sup>*Departamento de Química Orgánica, Universidad de Valencia, Doctor Moliner 50, 46100, Burjassot, Valencia, Spain*

<sup>c</sup>*CIBER de Bioingeniería, Biomateriales y Nanomedicina (CIBER-BBN), Spain*

e-mail: [jordi.roig@uv.es](mailto:jordi.roig@uv.es)

$\gamma$ -butyrolactone (GBL) is a chemical substance that is commonly used as a solvent or additive in the manufacture of fertilizers, herbicides and pharmaceuticals. In recent years, it has been employed as a drug-facilitated sexual assault (DFSA) agent [1]. Following its oral intake, GBL is rapidly metabolized into  $\gamma$ -hydroxybutyric acid (GHB), one of the most used drugs in chemical submission assaults due to its sedative effect on the body [2]. The increasing illicit use of GBL has prompted us to develop simple yet sensitive assays for its *in situ* detection in biological matrices such as saliva.

Previously, we reported two new optical probes based on the naphthoxazole core to detect GHB in real-time in real samples of soft drinks and alcoholic beverages [3]. This discovery prompted us to design a fluorescent chemosensor to further increase the sensitivity and selectivity in the detection of GBL in saliva. The chemosensor is based on a fluorescein derivative in which a naphthoxazole ring is present.



**Figure 1.** (A) Structure of the fluorescent chemosensor used in the detection of GBL. (B) ON-OFF fluorescence change observed under UV light of the chemosensor in the presence of GBL.

### References:

- [1] A. Alías, M. I. Folgar, C. S. Taboada, A. R. Boubeta, K. Mccartan, Drug-facilitated sexual assault and chemical submission. *Psychology, Society, & Education* 9, 263-282 (2017); doi: 10.25115/psyse.v9i2.701
- [2] L. Dufayet, S. Bargel, *et al.*, Gamma-hydroxybutyrate (GHB), 1,4-butanediol (1,4-BD), and gamma-butyrolactone (GBL) intoxication: A state-of-the-art review, *Regulatory Toxicology and Pharmacology* 142, (2023); doi: 10.1016/j.yrtph.2023.105435
- [3] S. Rodríguez-Nuévalos, A. M. Costero, *et al.*, Protection against chemical submission: Naked-eye detection of gamma-hydroxybutyric acid (GHB) in soft drinks and alcoholic beverages. *Chemical Communications* 56, 12600-12603 (2020); doi: 10.1039/D0CC05387B

**PÓSTER P-2****DETERMINACIÓN DE CATINONAS SINTÉTICAS EN FLUIDOS BIOLÓGICOS MEDIANTE  
POLÍMEROS DE IMPRONTA MOLECULAR Y CROMATOGRAFÍA DE GASES ACOPLADA  
A ESPECTROMETRÍA DE MASAS**

Miguel Muñoz Bartual, Paloma Arjona Mudarra, Francesc A. Esteve Turrillas,  
Salvador Garrigues Mateo

<sup>a</sup> Departamento de Química Analítica, Universitat de València.

Edificio "Jeroni Muñoz". C/ Dr. Moliner 50, 46100-Burjassot, Valencia

e-mail: [miguel.munoz-bartual@uv.es](mailto:miguel.munoz-bartual@uv.es)

En la actualidad, los métodos analíticos para la determinación de nuevas sustancias psicoactivas (NPS) en fluidos biológicos se basan principalmente en el empleo de detectores de masas acoplados a cromatografía de gases o de líquidos. Debido a la complejidad de las matrices y la baja concentración de los analitos, el tratamiento de las muestras es un paso esencial en el proceso analítico, siendo comúnmente utilizados métodos como la extracción líquido-líquido (LLE) y la extracción en fase sólida (SPE) [1]. Los polímeros de impronta molecular (MIPs) son materiales sintéticos de reconocimiento capaces de interactuar con uno o varios analitos objetivo para obtener sorbentes selectivos de SPE [2]. En este estudio, se sintetizaron MIPs mediante polimerización por precipitación utilizando ácido metacrílico como monómero funcional y dimetacrilato de etilenglicol como agente entrecruzante, en una proporción de 1:4:100, siendo la  $\alpha$ -PHiP la que se ha seleccionado como molécula plantilla. El MIP obtenido se empleó como sorbente para la extracción selectiva de siete catinonas sintéticas en fluidos biológicos, seguido de su determinación mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. Los parámetros que afectan a la etapa de extracción, como son la cantidad de fase sorbente, el pH de la muestra, la disolución de lavado, y la naturaleza y el volumen de la fase eluyente fueron estudiados con la finalidad de maximizar la eficiencia de extracción. El método finalmente propuesto proporciona recuperaciones cuantitativas con valores de

desviación estándar relativa inferiores a 20 % y límites de cuantificación entre 4 y 10  $\mu\text{g L}^{-1}$  para el conjunto de las 7 catinonas consideradas. Además, permite una extracción altamente selectiva de las catinonas sintéticas estudiadas en muestras de orina y fluidos orales, en ambos con un rendimiento comparable, que garantiza la correcta determinación de las sustancias de abuso consumidas.

**Agradecimientos:**

Los autores agradecen al Proyecto **PND2022I030** financiado por la Delegación del Gobierno Español para el Plan Nacional sobre Drogas, por el apoyo económico para realizar este estudio

**Referencias:**

- [1] F.A. Esteve-Turrillas, et al. J. Chromatogr. A 1633 (2020) 461615.
- [2] M. Arabi, et al. Trends Analyt. Chem. 128 (2020) 115923.

**PÓSTER P-3****ANÁLISIS DE AGUAS RESIDUALES PARA ESTABLECER RELACIONES ENTRE CONSUMO DE DROGAS Y PSICOFÁRMACOS Y FACTORES SOCIALES**

Patricia García-Atienza, Ángela Reig, Ángel Morales-Rubio, Sergio Armenta

Departamento de Química Analítica, Edificio Jeroni Muñoz, Universitat de València. C/ Doctor Moliner, 50, 46100 Burjassot, España.

e-mail: [patricia.garcia-atienza@uv.es](mailto:patricia.garcia-atienza@uv.es)

Desde el año 2000, el uso de antidepresivos en España ha aumentado un 250%, con una media de 150 dosis diarias por cada 1000 habitantes, y con valores de 300 en grupos de mayor edad.<sup>1</sup> El análisis epidemiológico empleando aguas residuales se ha desarrollado ampliamente durante las últimas décadas, aplicándose a diferentes áreas, como el consumo de drogas ilícitas o patógenos en la población. Esta metodología ya se ha aplicado en España, donde se han llevado a cabo estudios sobre el consumo de drogas en prisiones<sup>2</sup> o en ciudades.<sup>3</sup> Se ha demostrado que las aguas residuales son un indicador muy útil para el estudio del exposoma, el cual se define como la medida de todas las exposiciones de un individuo a lo largo de su vida y cómo esas exposiciones se relacionan con la salud. En la mayoría de programas actuales, la vigilancia se lleva a cabo en plantas de tratamiento de aguas residuales, lo que permite una toma de muestra que no plantea riesgos éticos, de carácter imparcial, anónimos y no intrusivo.

El presente trabajo consiste en el análisis de drogas y psicofármacos, incluyendo ansiolíticos, antidepresivos y sedantes en aguas residuales y el posterior tratamiento de los datos para establecer tendencias entre el consumo de estos fármacos y desigualdades sociales (densidad de población, renta per cápita, paro, edad poblacional, etc.). La toma de muestras ha sido realizada en diferentes municipios de la provincia de Valencia, donde se incluyen localidades con áreas densamente pobladas así como poblaciones cuya densidad de población no supere los 10 hab./km<sup>2</sup>.

## Referencias

<sup>1</sup>Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico (OECD)

<sup>2</sup>Postigo C. et al. *Environ. Int.* **37** (2011) 49-55.

<sup>3</sup>Mendoza A. et al. *Environ. Int.* **86** (2016) 107-118.

**PÓSTER P-4****ESTABLISHMENT OF A PROCEDURE FOR THE IDENTIFICATION OF METABOLITES  
DERIVED FROM SYNTHETIC CATHINONES**

Maria Garrigues Ruiz<sup>a</sup>, David Pérez-Guaita<sup>a</sup>, Guillermo Quintás<sup>b</sup>, Francesc A. Esteve  
Turrillas<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Department of Analytical Chemistry, Universitat de València, València, España

<sup>b</sup> Leitat Tehnological Center, Terrassa, España

e-mail: [maria.garriguesruiz@gmail.com](mailto:maria.garriguesruiz@gmail.com)

Synthetic cathinones are substances derived from cathinone, a natural compound found in the leaves of the plant *Chata edulis*, characterized by their psychostimulant effects, similar to the amphetamine due to their structural similarity. According to data from the European Union Drugs Agency (EUDA), synthetic cathinones represents the second group of New Psychoactive Substances (NPS) reported [1]. Their control is therefore a major challenge for Public Health due to the ease of access in illicit markets, as well as their reported toxic and lethal effects.

In the present work we implemented a rapid and easy protocol for the toxicity evaluation and identification of metabolic profile from synthetic cathinones using the HepG2 hepatic cell line as an in vitro model due to their easy manipulation. This protocol also employs liquid chromatography coupled to high resolution tandem mass spectrometry (LC-HRMS/MS) as the main technique for the analysis of metabolites found in extracts from drug-treated cells.

We tested this protocol with the synthetic cathinones 3-CMC (3-chloromethcathinone) and 4-CMC (4-chloromethcathinone). The median lethal dose (LD<sub>50</sub>) was determined by cell viability assays, and for the metabolic study, incubation assays with the cathinones were performed and cell and media extracts were analysed by LC-HRMS/MS.

It was observed that the main metabolic pathways in both cathinones involve N-demethylation, keto reduction and N-acetylation reactions, but we didn't find differential metabolites for both cathinones.

**References:**

- [1] European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction, European Drug Report 2023: Trends and Developments.
- [2] Martínez-Sena, T., Moro, E., Moreno-Torres, M., et al. Arch Toxicol 6 (2023) 1723-1738.

**PÓSTER P-5****CANNABINOIDES EN ALIMENTOS DE CÁÑAMO: DESARROLLO DE UN MÉTODO ANALÍTICO PARA GARANTIZAR SU SEGURIDAD ALIMENTARIA**

Alejandro García-Juan<sup>a</sup>, María Pérez-Cerezo<sup>a</sup>, Sergio Armenta<sup>a</sup>, Olga Pardo<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Departamento de Química Analítica, Universitat de València, Dr. Moliner 50, 46100 Burjassot, España

e-mail: [alejandro.garcia-juan@uv.es](mailto:alejandro.garcia-juan@uv.es)

El cáñamo (*Cannabis sativa L.*) es una planta de creciente interés en la industria alimentaria debido a su alto valor nutricional y su potencial uso en alimentos funcionales. Además de ser una fuente rica en proteínas, ácidos grasos esenciales y fibra, contiene compuestos bioactivos como los cannabinoides. Algunos de ellos tienen propiedades beneficiosas para la salud, mientras que otros, como el  $\Delta^9$ -tetrahidrocannabinol ( $\Delta^9$ -THC), poseen efectos psicoactivos y están estrictamente regulados [1]. Esto hace imprescindible desarrollar métodos analíticos fiables que permitan su control en productos alimentarios derivados del cáñamo. Para ello, el objetivo de este trabajo es desarrollar un método analítico para la cuantificación simultánea de ocho cannabinoides (CBG, CBD, CBN, THCV,  $\Delta^9$ -THC,  $\Delta^8$ -THC,  $\Delta^9$ -THCA-A y CBDA) en alimentos derivados del cáñamo mediante cromatografía líquida de ultra-alta resolución acoplada a espectrometría de masas en tándem (UHPLC-MS/MS).

Para la extracción de los analitos, se exploraron diferentes estrategias. El uso de metanol como disolvente de extracción presentó un fuerte efecto matriz, limitando su aplicación. Se evaluó también el método QuEChERS, realizando una primera etapa de extracción seguida de una purificación mediante SPE dispersiva. Sin embargo, las aminas secundarias (PSA) utilizadas como purificantes retenían los ácidos carboxílicos (THCA-A y CBDA), obteniendo así valores bajos de recuperación de estos analitos. Finalmente, se seleccionó el primer paso de extracción QuEChERS utilizando acetonitrilo:agua (2:1) como disolvente de extracción junto con las sales  $MgSO_4$ , NaCl, citrato de sodio e hidrogenocitrato de sodio sesquihidratado. Los resultados obtenidos son satisfactorios utilizando como blanco de matriz una muestra de pan rallado. Sin

embargo, aún es necesario realizar más pruebas para evaluar las recuperaciones y el posible efecto matriz en muestras de alimentos derivados del cáñamo. El objetivo final de este trabajo es validar el método en diferentes matrices alimentarias y aplicar su uso en el control de la presencia de cannabinoides en productos alimentarios, garantizando así su cumplimiento con la normativa vigente.

**Agradecimientos:**

Este trabajo ha sido apoyado por la Conselleria d'Educació, Universitats i Ocupació de la Generalitat Valenciana, proyecto **CIAICO2022/217**.

**Referencias:**

[1] Comisión Europea. REGLAMENTO (UE) 2023/915 DE LA COMISIÓN de 25 de abril de 2023 relativo a los límites máximos de determinados contaminantes en los alimentos y por el que se deroga el Reglamento (CE) n.º 1881/2006.

# VNIVERSITAT DE VALÈNCIA



*Proyecto 20221030*