

Supplementary data

Metabolite elucidation of 2-Fluoro-Deschloroketamine (2F-DCK) using molecular networking across three complementary in vitro and in vivo models

Thomas Gicquel^{1,2*}, Romain Pelletier¹, Camille Richeval^{3,4}, Alexandr Gish³, Florian Hakim^{3,4}, Pierre-Jean Ferron², Vadim Mesli⁵, Delphine Allorge^{3,4}, Isabelle Morel^{1,2}, Jean-michel Gaulier^{3,4}

1 - CHU Rennes, Laboratoire de toxicologie biologique et médico-légale, F-Rennes 35033, France

2 - Univ Rennes, INSERM, INRAE, CHU Rennes, Institut NuMeCan (Nutrition, Métabolismes et Cancer), F-35033 Rennes, France.

3 - CHU Lille, Unité Fonctionnelle de Toxicologie, F-59000 Lille, France

4 - Univ. Lille, ULR 4483 – IMPECS – IMPact de l'Environnement Chimique sur la Santé humaine, F-59000 Lille, France

5 - CHU Lille, Service de Médecine Légale, F-59000 Lille, France

* Correspondence to:

Dr. Thomas Gicquel (ORCID: 0000-0002-2354-1884 and Publons: Q-1880-2019)

Laboratoire de toxicologie biologique et medico-légale, CHU Pontchaillou, 2 Rue Henri Le Guilloux, 35000 Rennes.

thomas.gicquel@chu-rennes.fr

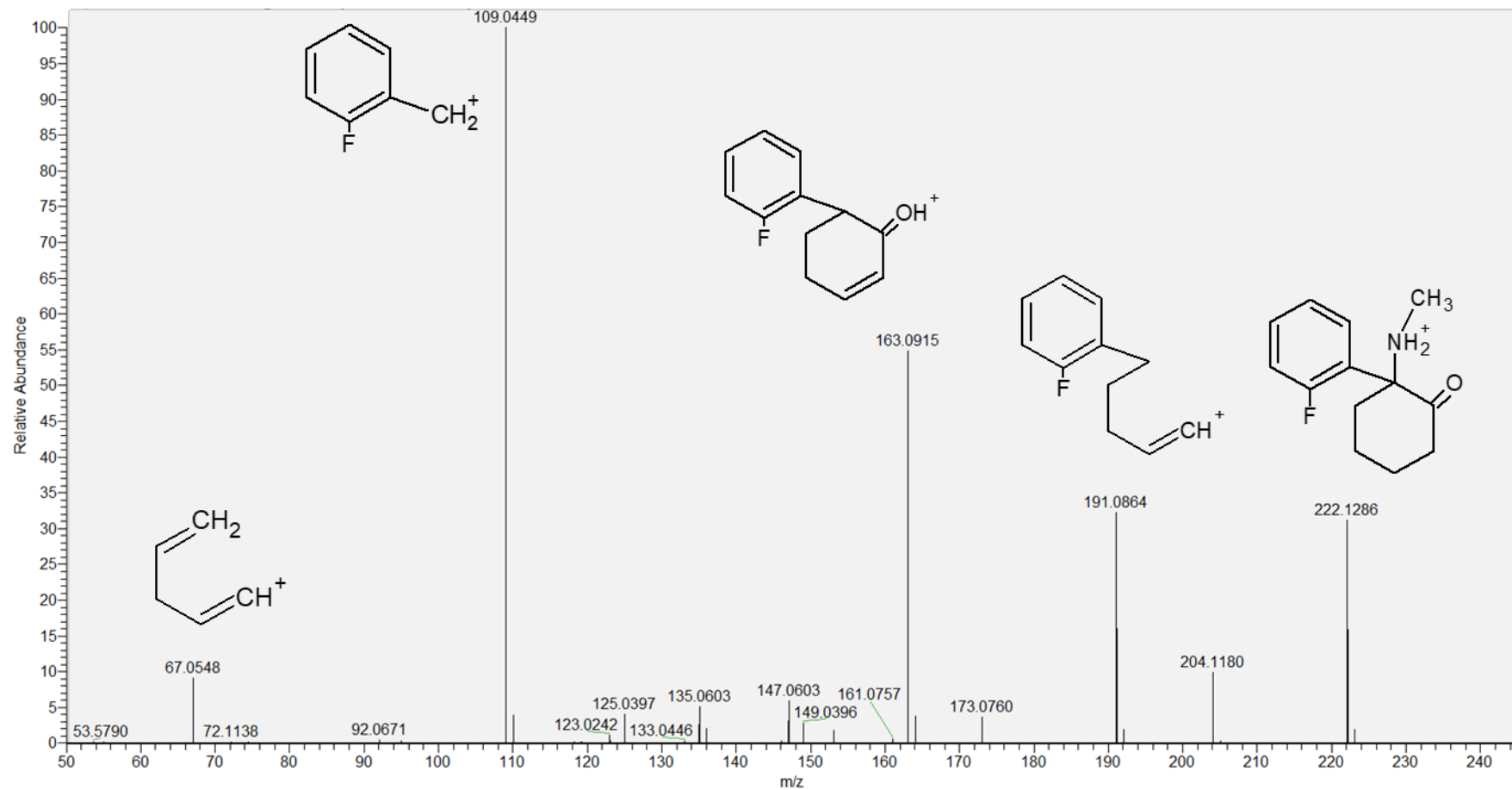


Figure S1: Proposed fragmentation pattern of 2F-DCK.