

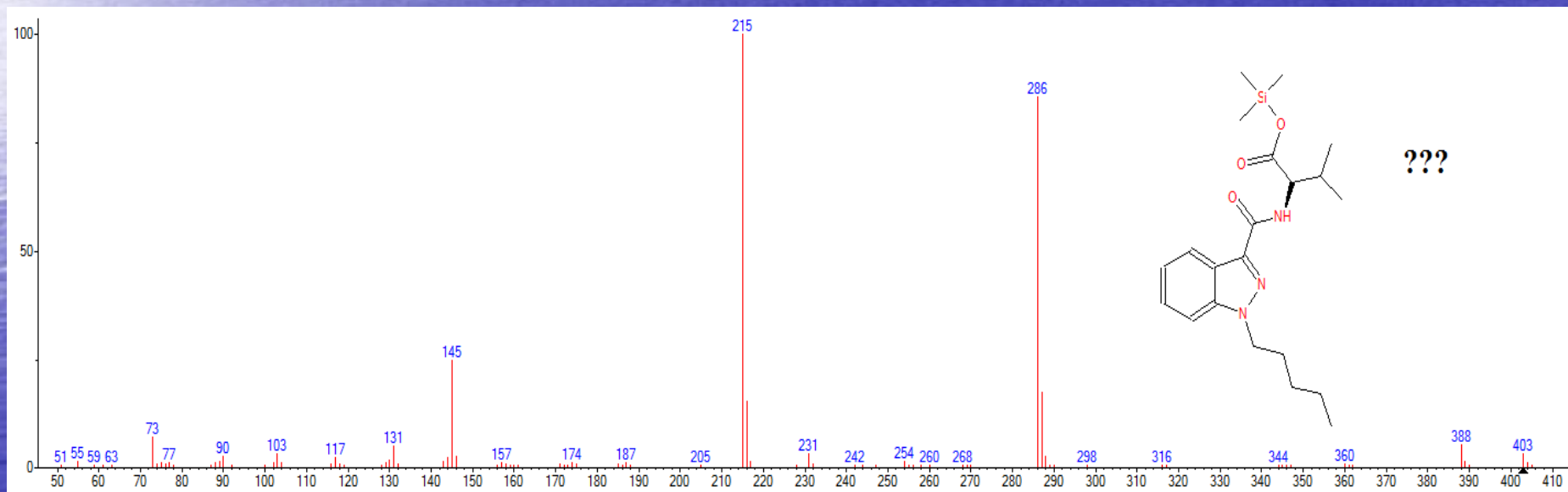
Опыт создания и ведения баз
масс-спектральных данных
жидкостной и газовой хромато-
масс-спектрометрии в Томском
обл. наркодиспансере

ООО «Лабтех»

Томский областной
наркологический диспансер

- Опыт ведения собственных баз данных в ОГБУЗ ТОНД насчитывает уже более 10 лет. Первые попытки заключались в ведении баз данных соединений, опознанных по доступным библиотекам, в этом случае в «свою» базу данных заводились масс-спектры полученные на своем оборудовании, масс-спектры из доступных баз данных, а также делалась привязка к индексу удерживания, рассчитанному с помощью углеводородной шкалы. Для всех этих целей использовалось ПО AMDIS, простое и интуитивно понятное, легко решающее указанные задачи

- Особую актуальность и значимость собственные базы данных приобрели с появлением дизайнерских наркотиков. Однако, на первые роли в таком случае вышла обоснованность таких баз данных. Потому что вопрос соответствия стр-ре вещества полученному масс-спектру, с учетом применения только моноквадрупольных систем низкого разрешения, зачастую мог быть решен только умозрительно. Также были предприняты попытки ведения баз данных по литературным данным, путем оцифровывания масс-спектров, из научных статей в реферируемых журналах, однако зачастую информация добываемая из научных источников оказывалась устаревшей.

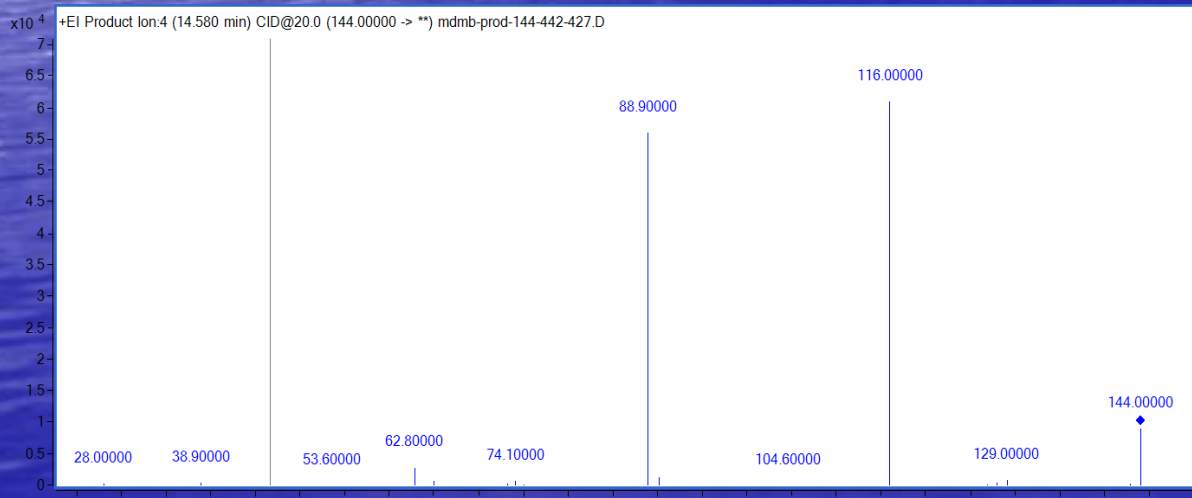
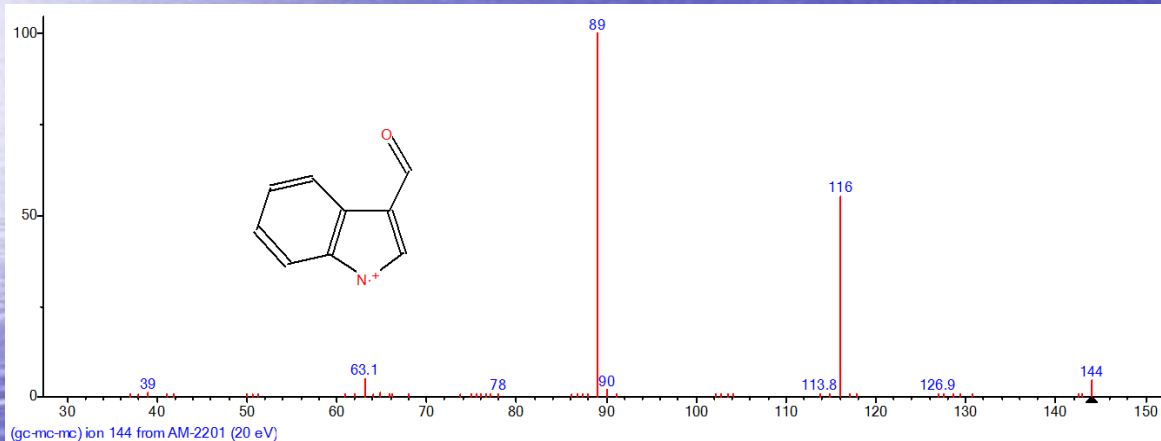


Рост парка аналитического оборудования закономерно привел к повышению обоснованности масс-спектров в создаваемых базах данных. Первый шаг был сделан с приобретением гх-мс-мс системы Agilent 7890\7000 «тройной квадруполь».

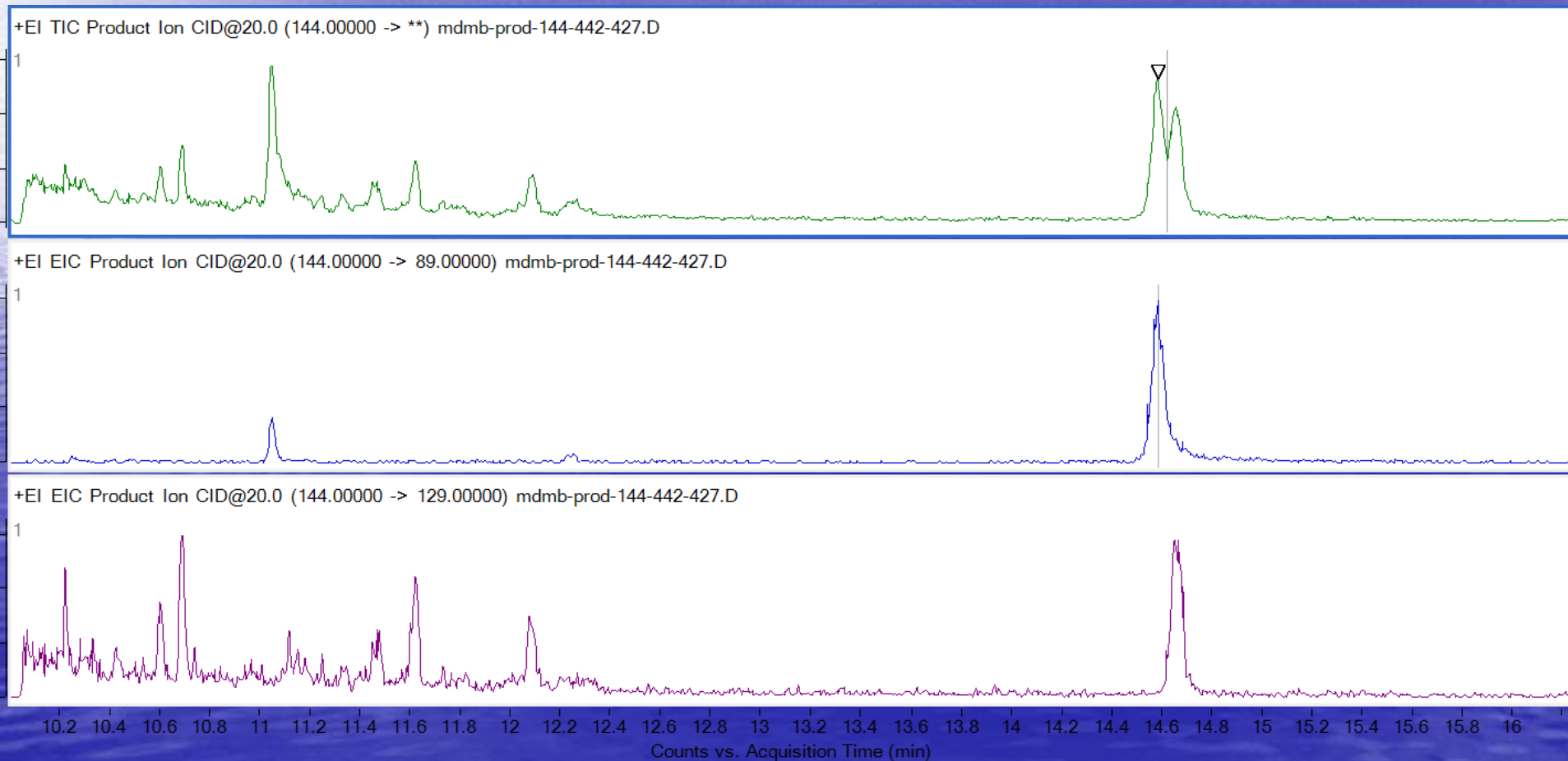
К достоинствам данной системы относится легкость переноса полученных экспериментальных данных на простые системы гх-мс. (метод хроматографирования, привязка к RI, пробоподготовка).

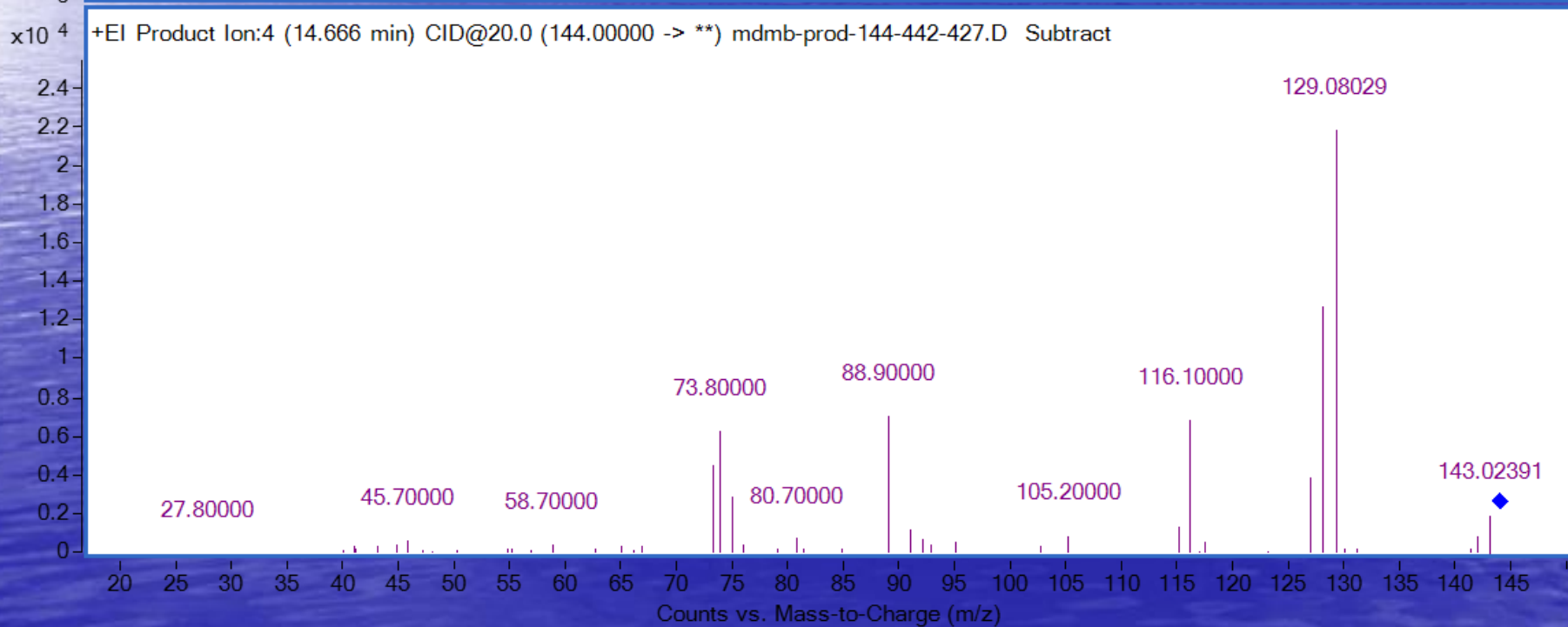
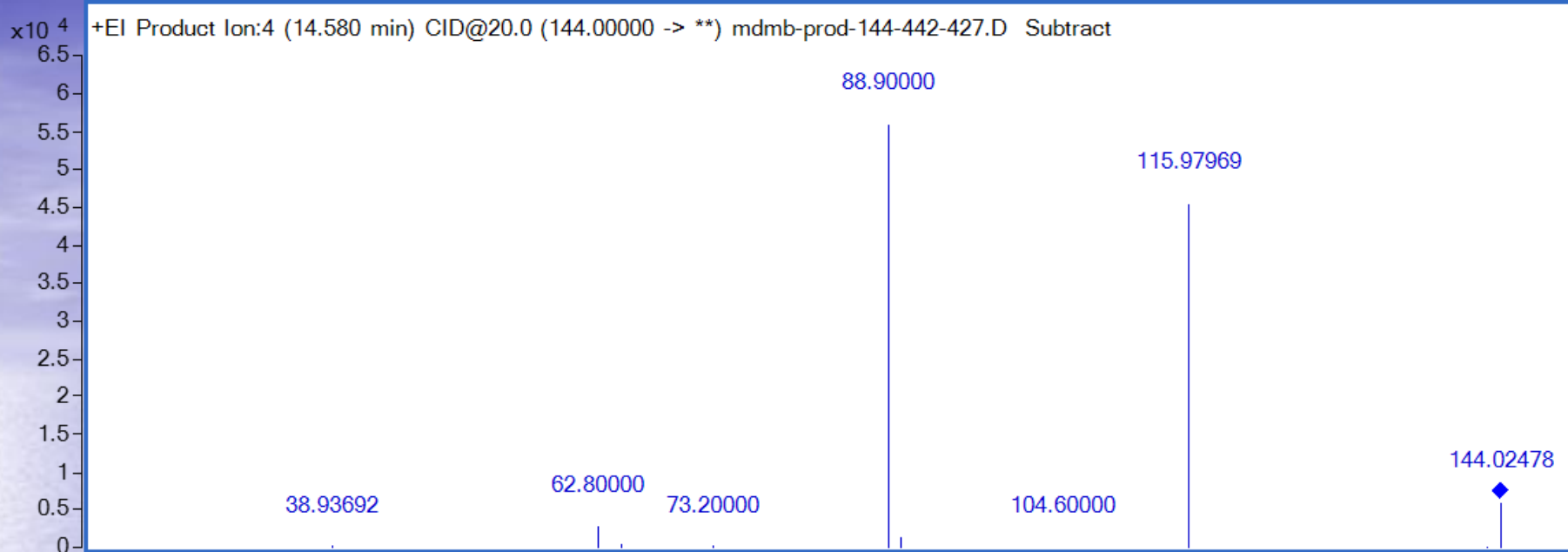


- Какие данные позволила получать эта система? За счет чего возрасла обоснованность баз данных? Данная система позволила изучать фрагментацию более высокого порядка. Видеть, на что и как распадаются ионы, образованные в ходе электронного удара. К примеру если на хроматограмме обнаруживается вещество с ионами 145,233,304, то логично предположить что это вещество имеет отношение к нарк. ср-ву. АВ-РІNАСА-*F*, которое также имеет аналогичные ионы в масс-спектре, однако не исключено и возникновение ошибки, с учетом того, что биологические матрицы зачастую содержат тысячи соединений, в которых могут быть как такие же ионы, так и их соотношения. Наличие тандемной масс-спектрометрии позволяет увидеть фрагментацию каждого из ионов предполагаемого метаболита и сравнить ее с фрагментацией исходного соединения.



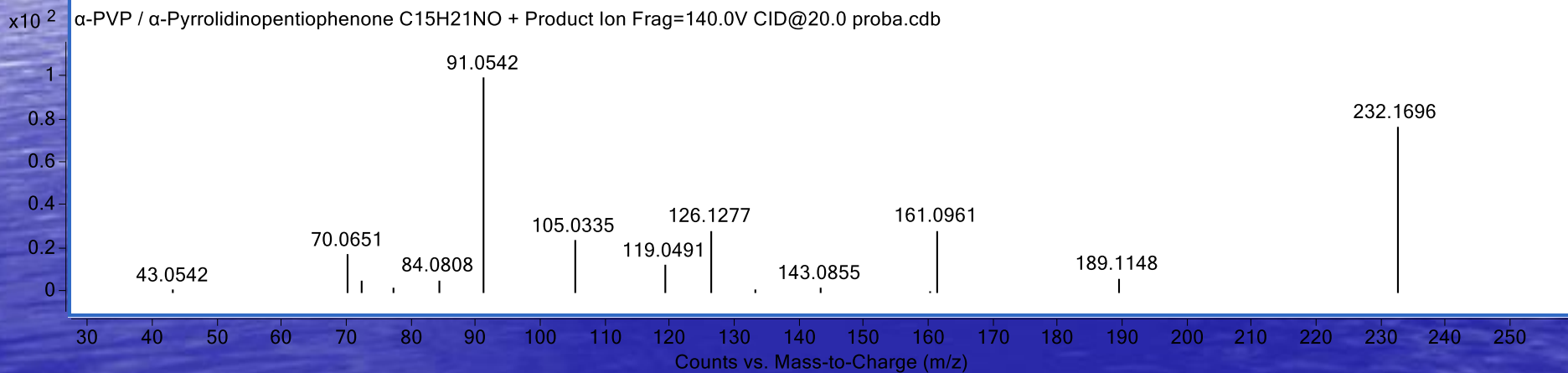
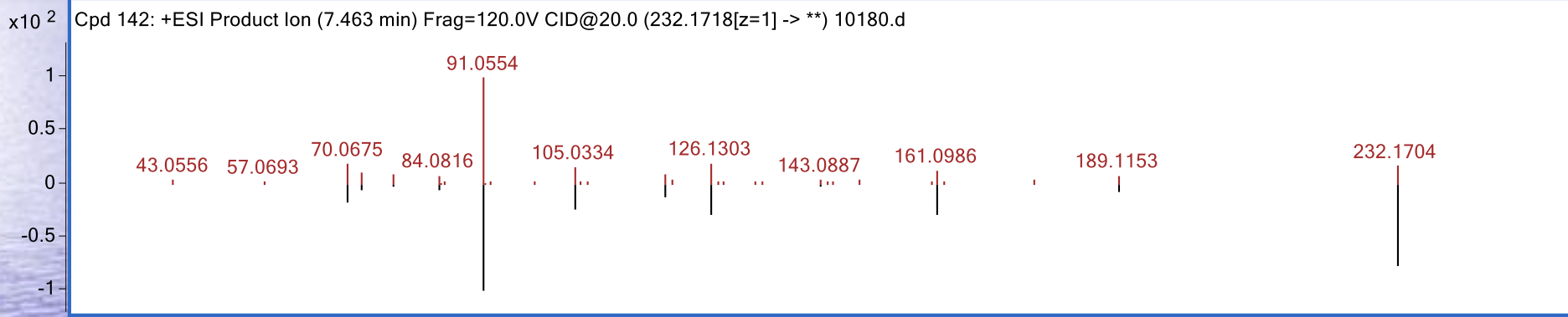
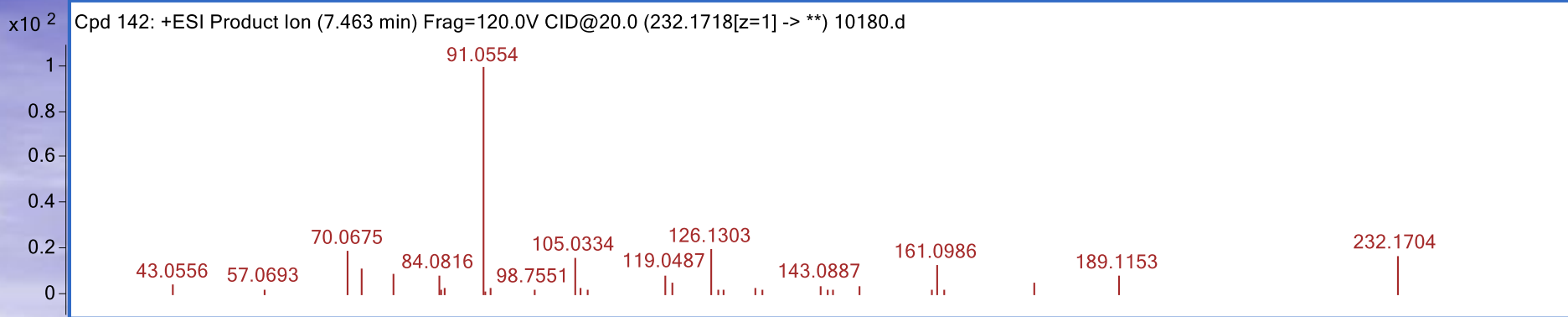
- К дополнительным возможностям поиска с помощью данного метода относится использование ряда режимов работы прибора. Например режим «product ion» позволяет регистрировать только спектры соударений от указанного списка родительских ионов, что позволяет выявлять на хроматограммах классы соединений. Например регистрируя масс-спектры родительского иона 144, и просматривая полученные хроматограммы по дочернему иону 89, можно обнаружить все производные индола, которые находятся в образце, отфильтровывая ненужную информацию.





Дальнейшим шагом по созданию и ведению баз данных масс-спектров стало внедрение в повседневную практику системы ВЭЖХ-мс-мс высокого разрешения. Метод позволяет:

- - вести собственные базы данных масс-спектров высокого разрешения, записанные при различных энергиях соударений и разных полярностях
- - использовать их в скрининговых исследованиях.
- Достоверность идентификации по таким базам данных выше чем по данным мс низкого разрешения



- Кроме того, научная обоснованность таких баз данных намного выше, так как при их формировании используются подходы идентификации метаболитов, основанные на применении методов тандемной масс-спектрометрии высокого разрешения. Подходы идентификации изложены более подробно в научной работе
- «Нецелевой скрининг маркеров синтетических каннабиноидов в моче методом высокоэффективной жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием».

А. В. Лабутин, А. З. Темердашев •

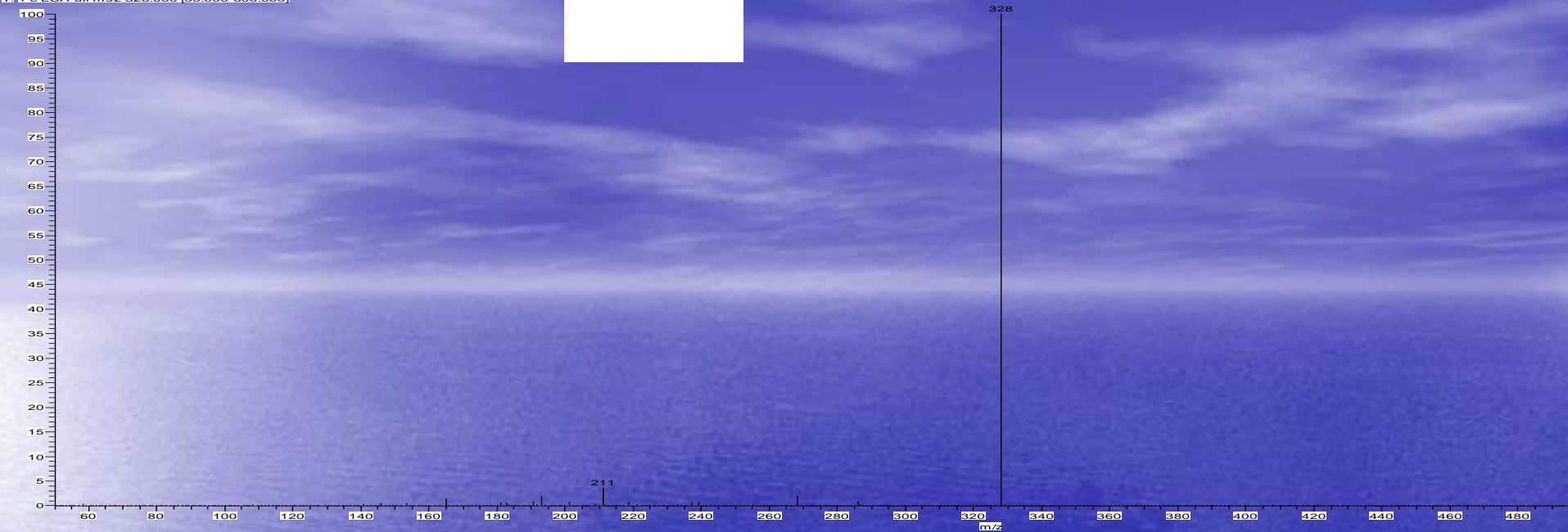
Журнал МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ 12 (1)'2015 •

Кроме того аналитические данные полученные в ходе – формирования баз данных ВЭЖХ-МС-МС могут быть использованы при создании баз данных для простых гх-мс систем

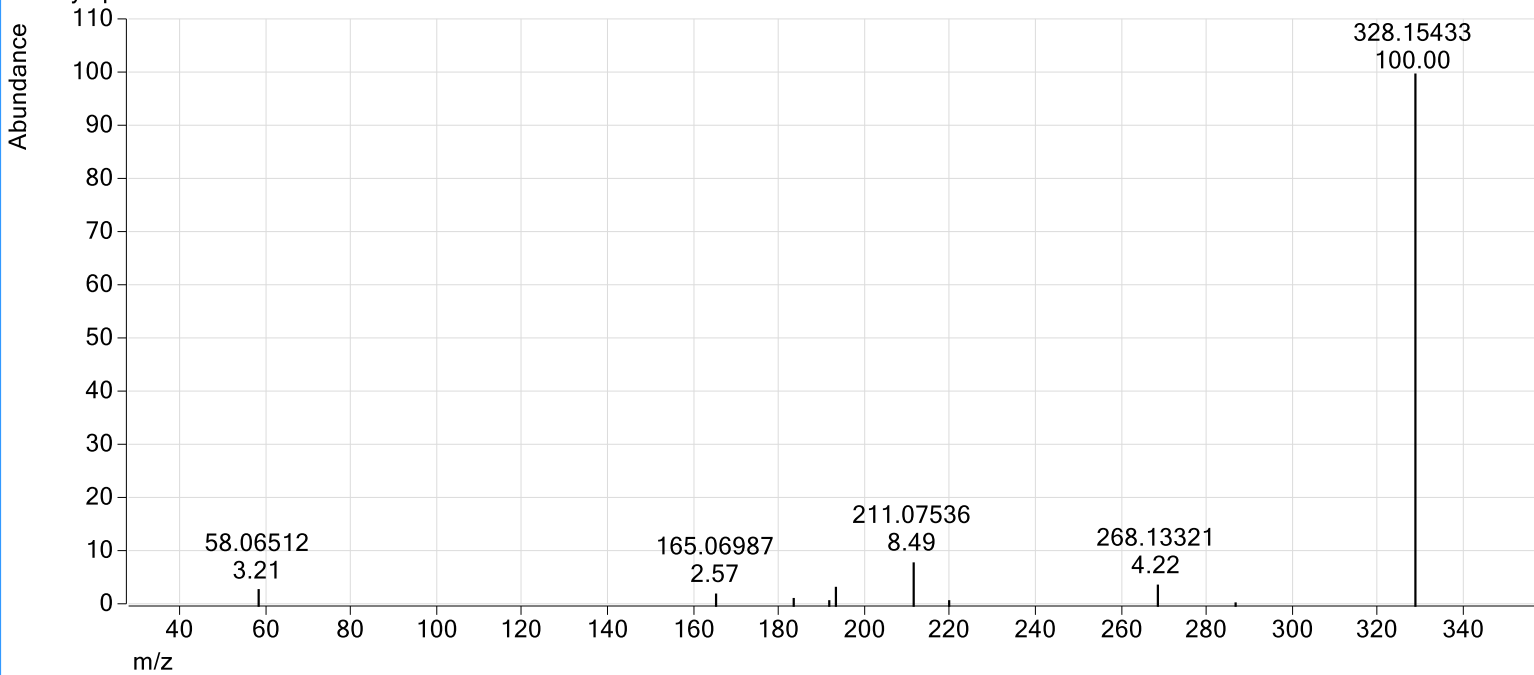
Универсальность ВЭЖХ-мс-мс спектров
Были сравнены спектры соударений
полученные на разных приборах, с
различными физическими принципами
работы. Результаты приведены ниже.

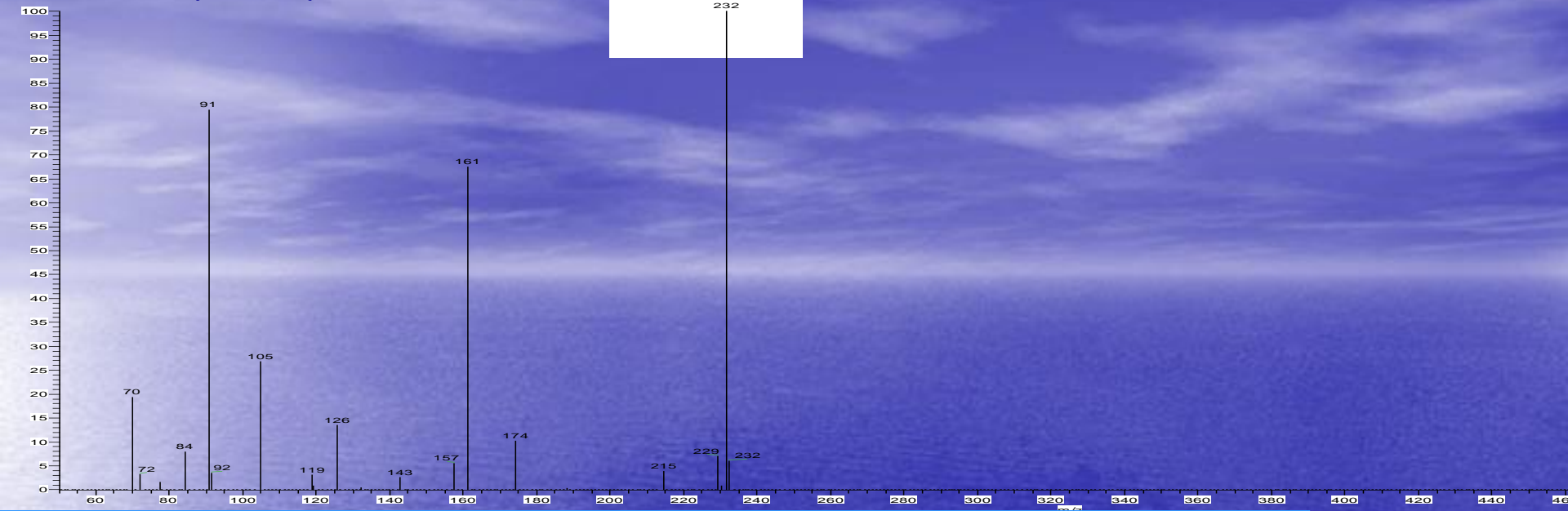
monacetylmorphine #305 RT: 1.88 AV: 1 NL: 1.39E8

T: +c ESI Full ms2 328.000 [50.000-600.000]

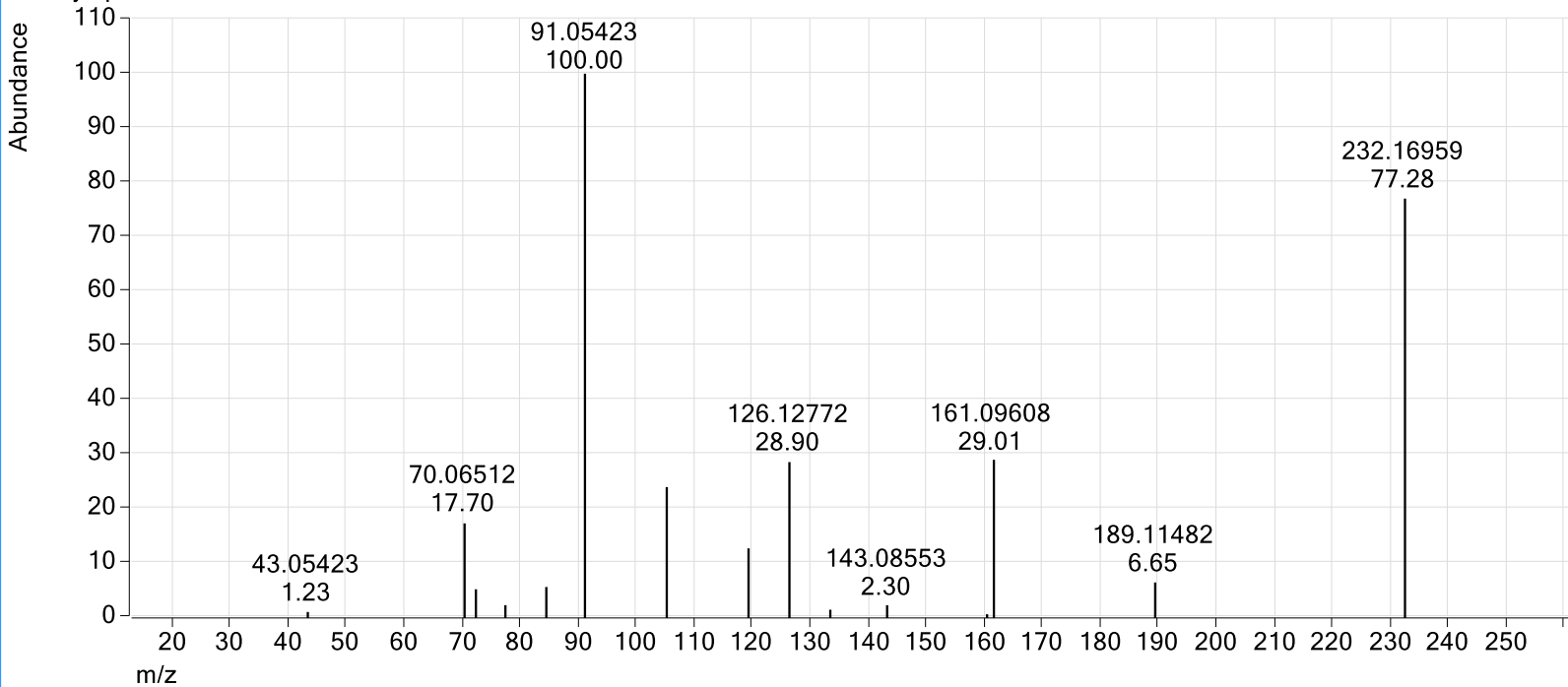


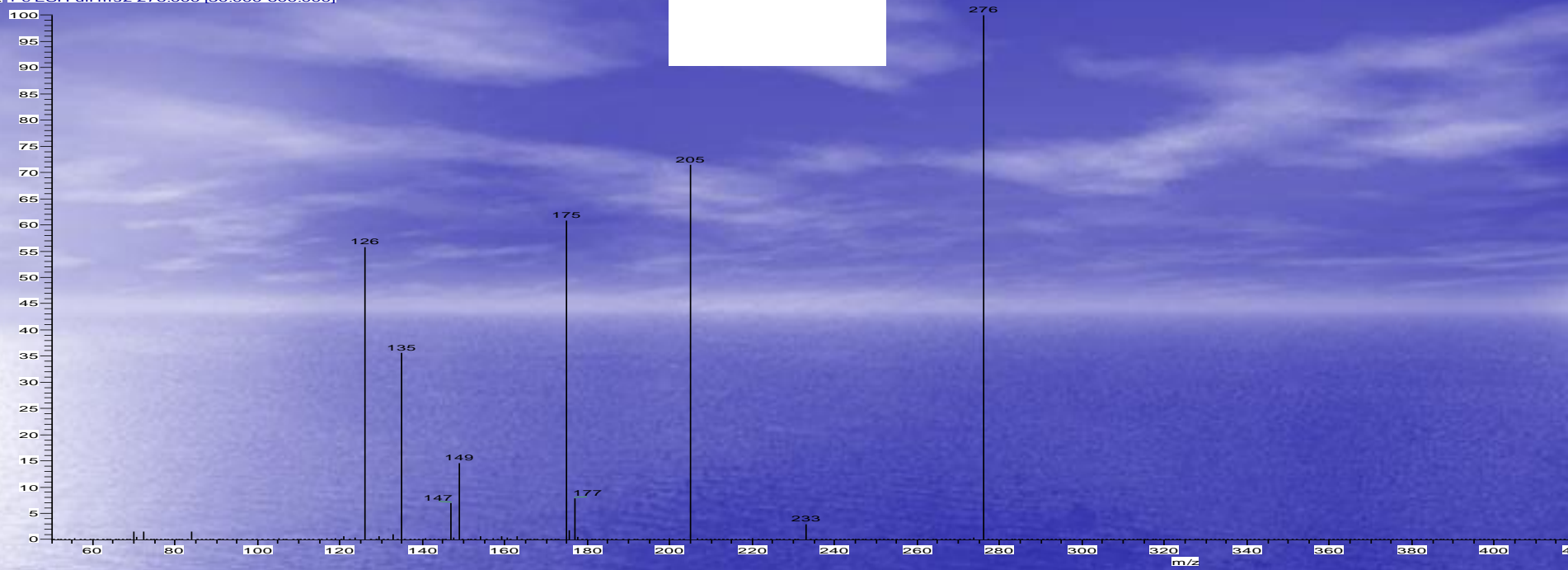
Library spectrum



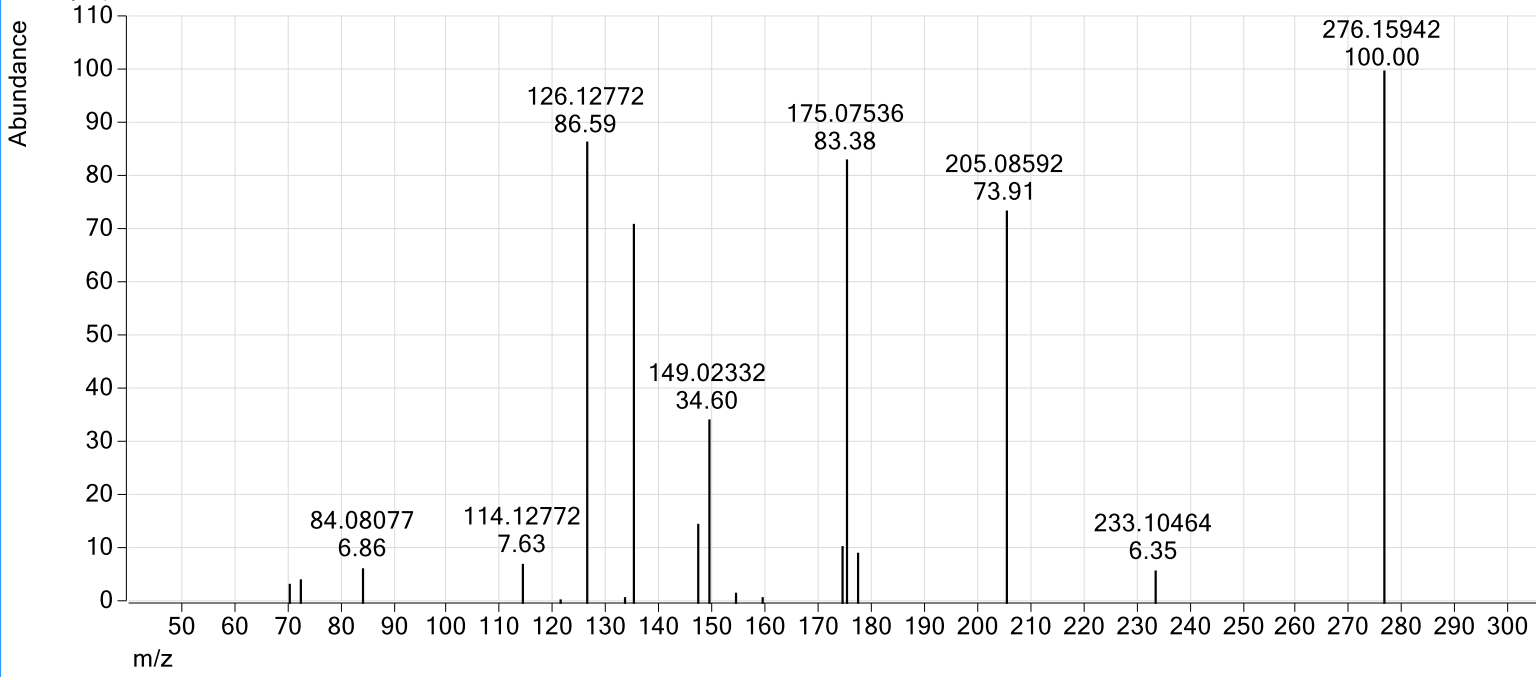


Library spectrum





Library spectrum



- Таким образом, как можно видеть, масс-спектры соударений полученные на разных приборах, с разными физическими принципами работы очень схожи. Однако на настоящий момент не имеется ПО позволяющему унифицировать библиотечный поиск подобно тому как это сделано в ГХ-МС. Но даже если бы оно и появилось, то работа с подобными базами данных требовала бы квалифицированного оператора.