

НЕКОММЕРЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ БИБЛИОТЕКА МАСС-СПЕКТРОВ ЭЛЕКТРОННОЙ ИОНИЗАЦИИ SUDMED MASS SPECTRA И НОВЫЙ САЙТ SUDMED MS

¹А.Л. Печников, ²А.М. Григорьев, ³А.Б.Мелентьев, ⁴С.А.Савчук,
⁵М.А. Гофенберг, ⁶М.А. Вагнер

¹ДНВОС: Сайт SUDMED-MS, Форум судебных медиков (ФСМ), г.Салехард

²ГБУЗ «Бюро судебно-медицинской экспертизы Московской области», г.Москва

³ГБУЗ «Челябинское областное Бюро судебно-медицинской экспертизы», г.Челябинск

⁴ФГБУ РЦСМЭ МЗ, ФГАОУ ВО Первый МГМУ им. И.М. Сеченова, г.Москва

⁵ГАУЗ СО «Областная наркологическая больница», г.Екатеринбург

⁶ГКУЗ «Бюро судебно-медицинской экспертизы ЯНАО», г.Салехард

В начале столетия в нашу жизнь прочно вошли новые способы общения и свободного распространения информации: Free softwareⁱ и Open Sourceⁱⁱ – в сфере компьютерных программ, Open Accessⁱⁱⁱ – в сфере обмена новыми научными знаниями, социальные сети – в сфере межличностного и профессионального общения. Информация и новые научные знания стали ближе и доступнее; интернет и дистанционные технологии сделали возможным профессиональное общение в реальном времени и независимо от расстояний. Разумеется, наше профессиональное сообщество специалистов в области судебно-химического и химико-токсикологического анализа не осталось в стороне от этих новаций.

Первой интернет-площадкой, на которой собрались профессионалы со всей страны, стал «Форум судебных медиков» (ФСМ, sudmed.ru), в рамках которого с середины 2000-х годов был создан раздел «Аналитическая и судебная токсикология». Он стал центром общения и коллаборации формировавшегося профессионального сообщества.

В 2008 году пользователем Alexlr был открыт раздел «Библиотеки масс спектров» для свободного обмена мини-библиотеками и отдельными спектрами новых психоактивных соединений, их метаболитов, артефактов и прочих производных (как в свободном состоянии, так и в виде газохроматографических дериватов). Новый раздел стал быстро наполняться спектрами, присылаемыми коллегами со всех концов страны и ближнего зарубежья. За 5 лет на форуме накопилось несколько сотен таких спектров, входящих во множество мини-библиотек.

В октябре 2013 года основателем раздела эти спектры были всесторонне проанализированы и систематизированы. Из 720 масс-спектров, которые профессиональное сообщество представляло для общего свободного использования на форуме ФСМ с 2008 года, была создана первая сборка сводной экспертной электронной библиотеки масс-спектров электронной ионизации **SUDMED_720_AMDISLIB_20131016**.

Новая некоммерческая библиотека быстро завоевала заслуженную популярность в среде специалистов. Она применялась для предварительной и подтверждающей идентификации в первую очередь метаболитов синтетических каннабимиметиков, дизайнерских наркотиков, а также и других, традиционных, наркотических средств, психотропных и сильнодействующих веществ в биологических объектах, анализируемых в судебно-химических и химико-токсикологических лабораториях.

Осенью 2014 г. оперативное включение в библиотеку спектров дериватов метаболитов нового синтетического каннабимиметика MDMB(N)-Bz-F (метилового эфира 2-(1-(4-фторфенилметил) – 1H-индазол – 3-карбоксамидо) – 3,3 – диметилбутановой кислоты, синонимы: MDMB(N)-FUB, MDMB-FUBINACA) и немедленная публикация новой сборки библиотеки позволила лабораториям по всей стране идентифицировать это опасное и токсичное новое психоактивное вещество, что сыграло важную роль в ликвидации последствий надвигающейся «эпидемии» интоксикаций [1].

Библиотека SUDMED MS содержит масс-спектры электронной ионизации низкого разрешения метаболитов контролируемых веществ синтетического и природного происхождения, в том числе новых психоактивных соединений (NPS), некоторых сопутствующих соединений, преимущественно в виде триметилсилильных и метильных и, в меньшей степени, пентафторпропионильных, трифторацетильных и ацетильных дериватов, а также их газохроматографические индексы удерживания. Кроме того, в сводную библиотеку включены спектры, взятые из открытых источников: библиотек SWGDrug, Rf-Des_drug, Pub_cann, интернет-порталов Cauman Chemical и sudmed.ru, а также ряда научных публикаций.

Химические структуры метаболитов ранее не встречавшихся новых психоактивных соединений расшифровываются на основании анализа фрагментации молекул, параметров хроматографического удерживания, химических свойств и, в дальнейшем, подтверждаются методами масс-спектрометрии высокого разрешения.

Масс-спектры, собранные в библиотеке, зарегистрированы с помощью квадрупольных масс-детекторов после хроматографического разделения на капиллярных колонках в режиме полного сканирования (энергия ионизирующих электронов 70 эВ).

Масс-спектры электронной библиотеки SUDMED MS представлены в форматах, совместимых с пакетами программ Agilent ChemStation, Mass Hunter и с поисковыми системами AMDIS, NIST MS Search. В библиотеку включена информация об основных синонимах, химических наименованиях, структурных формулах соединений, а также об их линейно-логарифмических алкановых индексах удерживания.

Библиотека SUDMED MS в 2014 году стала электронным приложением к информационным письмам ФГБУ НИЦ НАРКОЛОГИИ

(переименован в Национальный научный центр наркологии - филиал ФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр психиатрии и наркологии имени В.П. Сербского» Минздрава России) и методическим письмам ФГБУ «РЦСМЭ» Минздрава России. К настоящему времени этот пакет библиотек был загружен уже более трех тысяч раз.

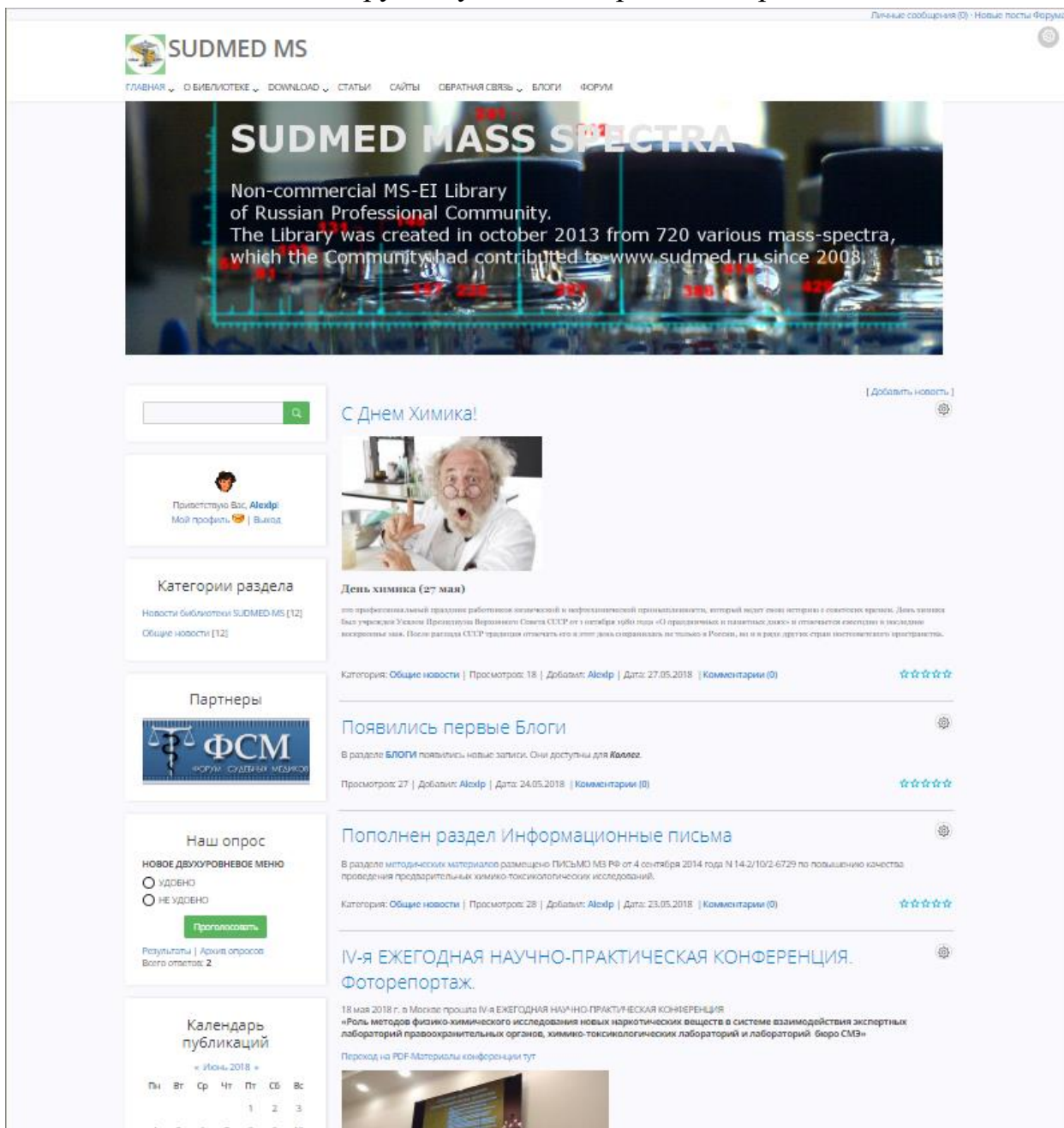


Рисунок 1: Главная страница нового сайта SUDMED-MS.MY1.RU.

С 2013 года до момента написания статьи было создано 82 сборки библиотеки, число спектров увеличилось в 3,4 раза и достигло 2428 в текущей официальной сборке **SUDMED_2428_LIB_20180501** [2].

К концу 2017 года стало очевидно, что проект SUDMED MASS SPECTRA перерос формат раздела в боковой ветке «Форума судебных

медиков», и поэтому 12 декабря 2017 года был создан новый, самостоятельный сайт: SUDMED-MS.MY1.RU (рис.1).

Новый сайт имеет удобный, интуитивно понятный интерфейс.

Доступ к содержимому сайта дифференцирован посредством введения различных уровней доступа: *Гости, Пользователи, Партнеры, Коллеги, Ведущие Коллеги*. Последние три группы имеют расширенные права. Чтобы стать их участником, необходимо не только зарегистрироваться на сайте через одну из соцсетей, но также и подтвердить свою профессиональную принадлежность. Это позволяет избежать бесконтрольного распространения специфичной профессиональной информации и обезопасить участников обсуждений.

Раздел «Библиотеки» включает подробное описание, список включенных спектров, условия использования, инструкцию по установке библиотеки (рис.2), и собственно библиотеку в четырех разных форматах.

Инструкция по установке библиотек SUDMED MS

Загруженный с сайта архив (например: *5_SUDMED_20171230.zip*) содержит в себе архивы библиотеки в четырех различных форматах:

- SUDMED_NNNN_NISTLIB_YYYYMMDD.zip** - библиотека в формате NIST Search
- SUDMED_NNNN_AMDISLIB_YYYYMMDD.MSP.zip** - библиотека в формате AMDIS
- SUDMED_NNNN_ACCLIB_YYYYMMDD.L.zip** - библиотека в формате Agilent ChemStation
- SUDMED_NNNN_MSHUNLIB_YYYYMMDD.mslibrary.xml.zip** - библиотека в формате Agilent MassHunter

Для работы с архивами zip достаточно штатных средств Windows. Или же Вы можете воспользоваться такими программами, как 7zip или WinRar :

Сперва распакуйте основной архив в какую-либо папку, например в папку **Загрузки**.

AMDIS:

Распакуйте архив **SUDMED_NNNN_AMDISLIB_YYYYMMDD.zip** и его содержимое скопируйте в папку **C:\NIST11\AMDIS32\LIB** (там по умолчанию хранятся библиотеки AMDIS) или в папку **C:\Database** (как Вам удобнее).

Откройте **Analyze|Setting** и выберите вкладку **Libr**.

Рисунок 2: Инструкция по установке библиотеки

Содержимое сайта можно разделить на четыре раздела.

➤ Библиотека SUDMED-MS.

- Статьи, ссылки на другие сайты.
- Блоги.
- Форумы.

Кроме официальной сборки, а также пакета библиотек версии 1.1, прилагаемого к информационным письмам ФГБУ ННЦ НАРКОЛОГИИ и доступных для скачивания всем группам пользователей, на сайте представлены черновые сборки. Они представляют собой рабочие, промежуточные варианты, которые доступны для скачивания только группой "Коллеги" и выше.

Мы делаем все возможное, чтобы собрать библиотеку высокого качества. Тем не менее, не существует баз данных, лишенных каких-либо ошибок или неточностей. Разумеется, мы не можем полностью предотвратить возникновение подобных случаев, но делаем все возможное для скорейшего исправления ошибок. Открытый, свободный формат библиотеки позволяет профессиональному сообществу контролировать качество ее содержимого. Все спектры проходят различные уровни верификации, а публикация черновых (предварительных) сборок библиотек позволяет оперативно выявлять и исправлять неточности.

Раздел статей и сайтов также структурирован и включает следующие категории:

- ✓ Хромато-масс-спектрометрия.
- ✓ Методические материалы (Информационные и методические письма, ГОСТЫ, МВИ).
- ✓ Судебная химическая медицинская экспертиза.

The screenshot shows the SUDMED MS website interface. At the top, there is a navigation bar with links for 'ГЛАВНАЯ', 'О БИБЛИОТЕКЕ', 'DOWNLOAD', 'СТАТЬИ', 'САЙТЫ', 'ОБРАТНАЯ СВЯЗЬ', 'БЛОГИ', and 'ФОРУМ'. The main content area features a search bar and a sidebar with 'Категории раздела' including 'Блоги от LisSB [4]', 'Блоги от Deminolog [1]', 'Хромато-масс-спектрометрия [0]', 'Судебная химическая медицинская экспертиза [0]', 'Химико-Токсикологический Анализ [0]', 'Вопросы профессионального образования [0]', and 'Вопросы сайтостроения [1]'. The main article is titled 'Вопросы на прямую линию' and discusses a question about the implementation of a government policy point regarding salary increases for medical professionals. The article includes a date of 07.06.2018 and 2 comments. Below it, another article titled 'О бедном хроматоме замолвите слово' is visible, dated 24.05.2018 with 5 comments.

Рисунок 3: Блоги.

- ✓ Химико-токсикологический анализ.
- ✓ Сайт

Содержимое этих разделов тщательно подбирается и рассчитано на широкий круг профессионалов с различным уровнем подготовки.

Не так давно на сайте появился новый раздел Блоги (рис.3), в котором наши *Ведущие Коллеги* имеют возможность делиться опытом, высказывать свое мнение по актуальным профессиональным вопросам, а *Пользователи* и *Коллеги* имеют возможность вести дискуссию через систему комментариев.

The screenshot displays the SUDMED MS FORUM interface. At the top, there is a navigation menu with links for 'ГЛАВНАЯ', 'О БИБЛИОТЕКЕ', 'DOWNLOAD', 'СТАТЬИ', 'САЙТЫ', 'ОБРАТНАЯ СВЯЗЬ', 'БЛОГИ', and 'ФОРУМ'. Below the navigation, there is a header for 'SUDMED MS FORUM' and a sub-header for 'SUDMED MS PRIVATE FORUM'. The main content area contains a table of forum topics with columns for 'Форум', 'Темы', 'Ответы', and 'Обновления'.

Форум	Темы	Ответы	Обновления
Общий раздел Общие вопросы развития сайта. Раздел открыт для ВСЕХ. Модератор форума: ALEXLP	3	4	Пятница, 26.01.2018, 13:41 » Тема: Регистрация и уровни доступа. Сообщение от: Alexr
Некоммерческая электронная библиотека масс-спектров SUDMED MS Обсуждение Библиотеки, новые спектры и т.п. Модератор форума: ALEXLP	2	2	Вторник, 10.04.2018, 10:32 » Тема: Submit Spectral Library (CSL) Сообщение от: Alexr
Конференции, семинары. Анонсы, программы, материалы. Модератор форума: ALEXLP	6	31	Четверг, 24.05.2018, 21:28 » Тема: IV Ежегодная научно-практическая конференция, г.Москва. Сообщение от: Alexr
Хромато-масс-спектрометрия Вопросы ГХ/МС, ВЭЖХ/МС, МС/МС, МСВР и т.п. Модератор форума: ALEXLP	2	3	Среда, 14.02.2018, 11:02 » Тема: Один атом в ионной ловушке Сообщение от: Alexr
Судебная химическая медицинская экспертиза Вопросы Судебной химической медицинской экспертизы Модератор форума: ALEXLP	2	0	Воскресенье, 10.06.2018, 15:19 » Тема: Ошибки судебной экспертизы Сообщение от: Alexr
Химико-Токсикологический Анализ Вопросы Химико-токсикологических исследований Модератор форума: ALEXLP	2	16	Воскресенье, 22.04.2018, 13:50 » Тема: Профстандарт "Специалист... Сообщение от: getmiana-ki1
Общение Начинающих Для тех, кто пока стесняется ... Модератор форума: ALEXLP	0	0	Нет сообщений

Форум	Темы	Ответы	Обновления
Общие вопросы приватной части форума Обсуждение раздела открыто для ВСЕХ. Модератор форума: ALEXLP	1	1	Среда, 23.05.2018, 11:27 » Тема: Права доступа в приватный ра... Сообщение от: Alexr
"New Psychoactive Substances" (NPS) Новые психоактивные вещества: дизайнерские наркотики, синтетические каннабимиметики, синтетические опиоиды и т.п. Только для "Коллег". Модератор форума: ALEXLP	4	8	Вторник, 10.04.2018, 11:07 » Тема: Newsletter from [Designer Dr... Сообщение от: Alexr
Общение Коллег Обсуждение узкопрофессиональных тем судебной химической медицинской экспертизы и клинического химико-токсикологического анализа. Только для "Коллег". Модератор форума: ALEXLP	6	4	Суббота, 09.06.2018, 09:29 » Тема: Перечень НСЛВ Республики Бел... Сообщение от: ikhachova121980

Рисунок 4: Форум.

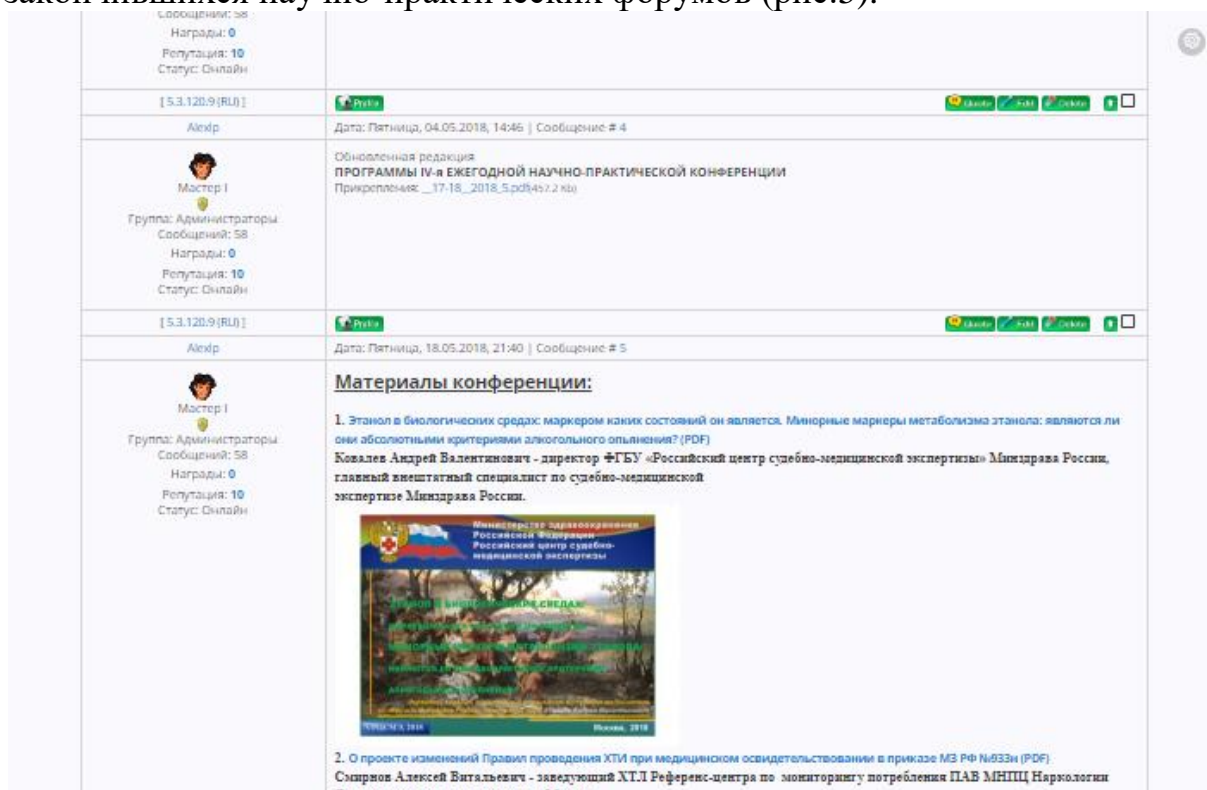
И, наконец, – SUDMED MS FORUM (рис.4)

Форум разделен на общедоступную и приватную часть.

Раздел PRIVATE FORUM создан для обсуждения узкопрофессиональных вопросов, для защиты информации и самих участников и имеет ограничения доступа к нему. Для участия в обсуждении в этом разделе необходимо представить дополнительную информацию о своих целях и профессиональной принадлежности администратору сайта, после чего вы можете получить доступ в этот раздел.

Список тем форума охватывает весь спектр вопросов, интересующих профессиональное сообщество и может служить удобной площадкой для плодотворного общения.

Следует особо отметить такую тему форума, как «Конференции, семинары», в которой не только публикуются анонсы предстоящих встреч, но и максимально оперативно выкладываются материалы только что закончившихся научно-практических форумов (рис.5).



The screenshot shows a forum thread with two messages. The first message is from user 'Alexr' dated Friday, 04.05.2018, 14:46, with the subject 'Обновленная редакция ПРОГРАММЫ IV-я ЕЖЕГОДНОЙ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ'. It includes a PDF attachment named '17-18_2018_5.pdf'. The second message is also from 'Alexr' dated Friday, 18.05.2018, 21:40, with the subject 'Материалы конференции:'. It contains a list of two documents: 1. 'Этанол в биологических средах: маркером каких состояний он является. Минорные маркеры метаболизма этанола: являются ли они абсолютными критериями алкогольного опьянения? (PDF)' by Ковалев Андрей Валентинович, and 2. 'О проекте изменений Правил проведения ХТИ при медицинском освидетельствовании в приказе МЗ РФ №833н (PDF)' by Сырнов Алексей Витальевич. Below the list is a thumbnail image of a conference poster with the text 'ВНИМАТЕЛЬНО ЧИТАЙТЕ СВЕДЕНИЯ' and '17-18 мая 2018 года'.

Рисунок 5: Материалы конференций.

На сайте реализована служба «Личные сообщения», посредством которой пользователи могут общаться между собой, а также система оповещений о размещении новых материалов и новых комментариев.

РЕЗЮМЕ

Консолидированными усилиями членов профессионального сообщества создана и постоянно пополняется уникальная некоммерческая электронная библиотека масс-спектров электронной ионизации

метаболитов новых синтетических психоактивных соединений, других наркотических средств и психотропных веществ для проведения предварительной и подтверждающей идентификации в биологических жидкостях и тканях при судебно-химическом и химико-токсикологическом анализе.

С целью оперативной публикации обновлений библиотеки и свободного доступа к ней создан сайт SUDMED-MS, дополнительной функцией которого является консолидация профессионального сообщества, создание площадки для свободного обмена научной информацией и обсуждения актуальных вопросов теории и практики судебно-химического и химико-токсикологического анализа. Он ориентирован на широкий круг специалистов с различным уровнем подготовки, позволяющий вывести профессиональное сообщество на новый уровень общения и сотрудничества.

Благодарности

Авторы статьи выражают глубокую благодарность авторам-контрибьюторам^{iv} включенных в библиотеку SUDMED-MS масс-спектров:

1. Васильев Андрей Борисович (Чебоксары, РНД),
2. Лабутин Андрей Валерьевич (Томск, КДЛ),
3. Шитов Леонид Николаевич (Ярославль, ХТЛ),
4. Снятков Александр Валерьевич (Владимир, СХО),
5. Колосова Мария Викторовна (Красноярск, КДЛ),
6. Самышкина Наталья Васильевна (Новый Уренгой, КДЛ),
7. Малышкина Анна Павловна (Ноябрьск, КДЛ),
8. Ризванова Лилия Нажиповна (Нижневартовск, КДЛ),
9. Подоленко Елена Викторовна (Сургут, КДЛ),
10. Джурко Юрий Александрович (г.Ярославль, СХО).

Отдельную благодарность авторы выражают Сергею Сергеевичу Катаеву (Пермь, СХО) - автору-контрибьютору многих масс-спектров и модератору раздела “Аналитическая и судебная токсикология” за его вклад в развитие проекта.

Список литературы:

1. Васильев А. Б., Ризванова Л. Н., Булыгина И. Е., и др. Опыт определения МДМВ(N)-Bz-F в моче методом газовой хроматографии с моноквадрупольным масс-селективным детектированием и высокоэффективной жидкостной хроматографии с тандемным масс-селективным детектированием в случае массовых отравлений // Наркология. — Москва, 2014. — 12. — С. 49—55.

2. Некоммерческая электронная библиотека

SUDMED_2428_AMDISLIB_20180501 // sudmed-ms.my1.ru / Под ред.

Печников А. Л.. — 2018. — <http://sudmed->

ms.my1.ru/load/oficialnye_sborki_biblioteki/2.

ⁱ **Свободное программное обеспечение (СПО**, англ. *free software*, также *software libre* или *libre software*), **свободный софт** — программное обеспечение, пользователи которого имеют права («свободы») на его неограниченную установку, запуск, свободное использование, изучение, распространение и изменение (совершенствование), а также распространение копий и результатов изменения. Если на программное обеспечение есть исключительные права, то свободы объявляются при помощи свободных лицензий. (Википедия)

ⁱⁱ **Открытое программное обеспечение** (англ. *open-source software*) — программное обеспечение с открытым исходным кодом. Исходный код таких программ доступен для просмотра, изучения и изменения, что позволяет убедиться в отсутствии уязвимостей и неприемлемого для пользователя функционала (к примеру, скрытого слежения за пользователем программы), принять участие в доработке самой *открытой программы*, использовать код для создания новых программ и исправления в них ошибок — через заимствование исходного кода, если это позволяет совместимость лицензий, или через изучение использованных алгоритмов, структур данных, технологий, методик и интерфейсов (поскольку исходный код может существенно дополнять документацию, а при отсутствии таковой сам служит документацией). (Википедия)

ⁱⁱⁱ **Открытый доступ** (англ. *Open access (OA)*) — бесплатный, быстрый, постоянный, полнотекстовый доступ в режиме реального времени к научным и учебным материалам, реализуемый для любого пользователя в глобальной информационной сети без каких-либо ограничений как по инструментам доступа, так и по дальнейшему использованию (например, лицензионных). (Википедия)

^{iv} **Контрибьютор** - человек или организация, которые вносят свой вклад в развитие того или иного проекта.