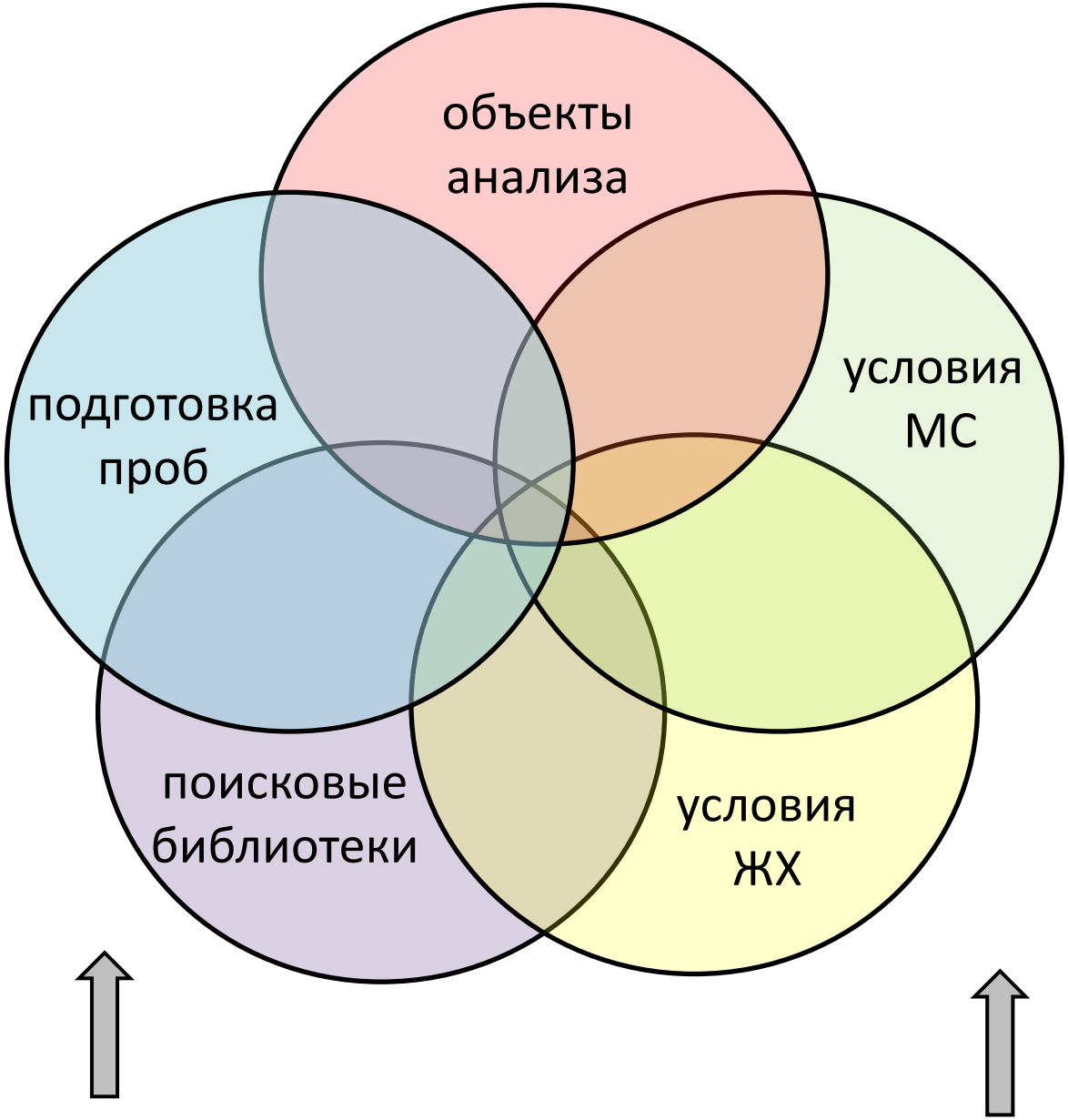
Обнаружение наркотических средств, лекарственных веществ и прочих токсических веществ, их метаболитов в объектах биологического происхождения при проведении судебно-медицинских химических и химико-токсикологических экспертных исследований методом жидкостной хроматографии – масс-спектрометрии с объемной ионной ловушкой

Григорьев А.М., Крупина Н.А.

ГБУЗ Московской области
«Бюро судебно-медицинской экспертизы»



ToxTyper (Bruker Daltonics)

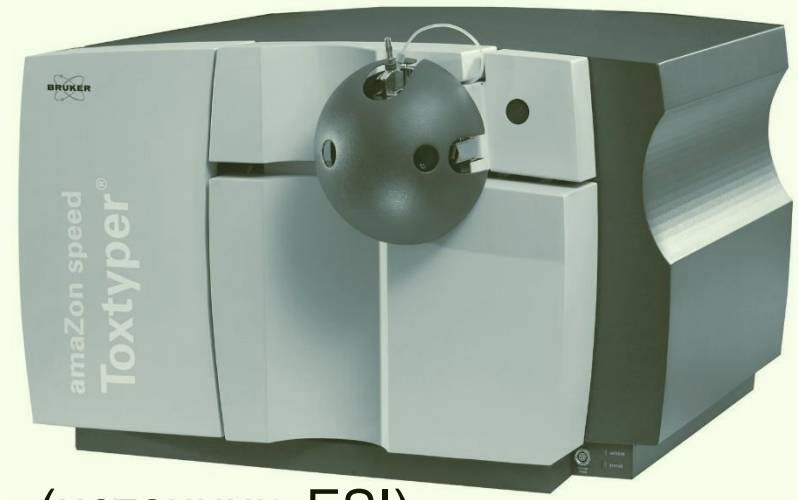
amaZon Speed ITrap (Bruker)

скрининг

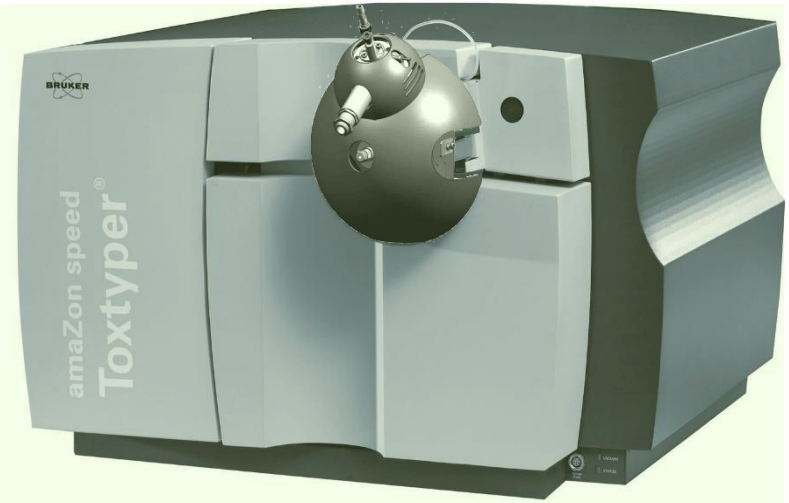
поиск и подтверждение

$МС^1$ – $МС^3$
время удерж.

$МС^1$ – $МС^2$
точная масса



(источник ESI)



(подогреваемый источник IonBuster)

6520 QTOF (Agilent)

Подготовка проб. Характеристика способов

Преимущественные объекты	**моча**	**кровь**	**моча**
Объем пробы, мкл	100	1000	1000
Способ	извлечение ацетонитрилом	высаливание ($NaHCO_3$) двойная экстракция	закисление экстракция этилацетатом
Степень концентрирования	1	10	10
Пригодность	большинство соединений	неизмененные и метаболиты фазы I	метаболиты фазы II
Непригодность	соединения с малым содержанием (немедицинские фентанилы, LSD)	метаболиты фазы II (глюкурониды, сульфаты)	гидрофильные основные соединения (фенэтиламины, катиноны)
Недостатки	малая степень концентрирования	значительное содержание ацетонитрила	значительное содержание ацетонитрила
Содержание CH_3CN ацетонитрила, %	10	50	50

Выбор иона-предшественника для дальнейшей фрагментации (2 варианта)

Выбор условий анализа ЖХ-МС^n: 2 варианта

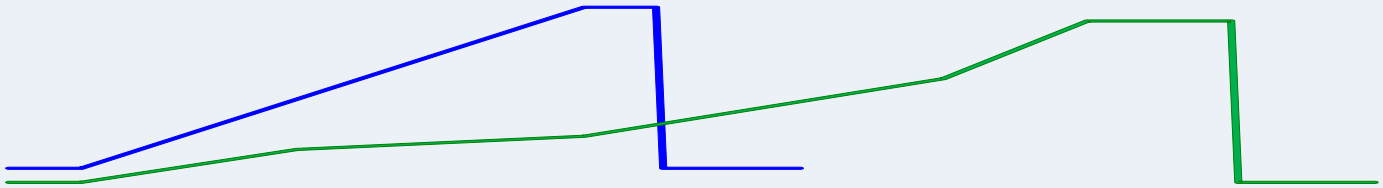
1. Указание желаемых ионов (список);

2. Обработка наиболее интенсивных ионов (1 в каждой точке хроматограммы);

МС

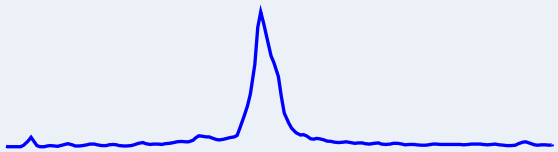
«короткий» градиент; ~ 1000 неизмененных соединений

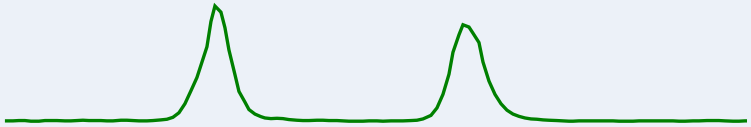
«длинный» градиент; ~ 4500 неизмененных соединений и метаболитов;



ЖХ

улучшение разделения





большая вероятность обнаружения (МС)

меньшая вероятность обнаружения (МС)

кровь

моча + ткани

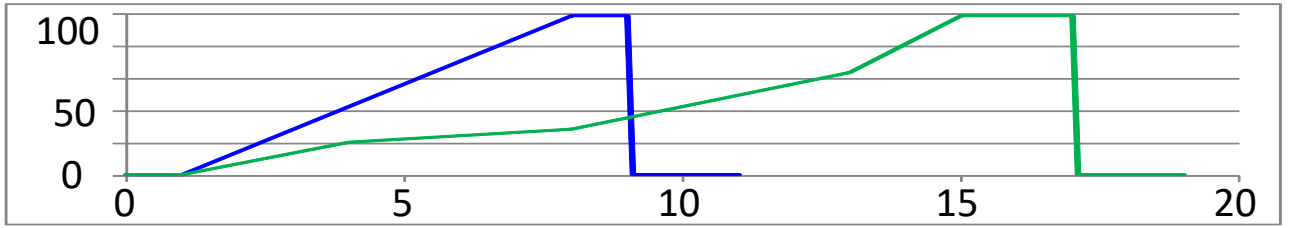
предпочтительные объекты

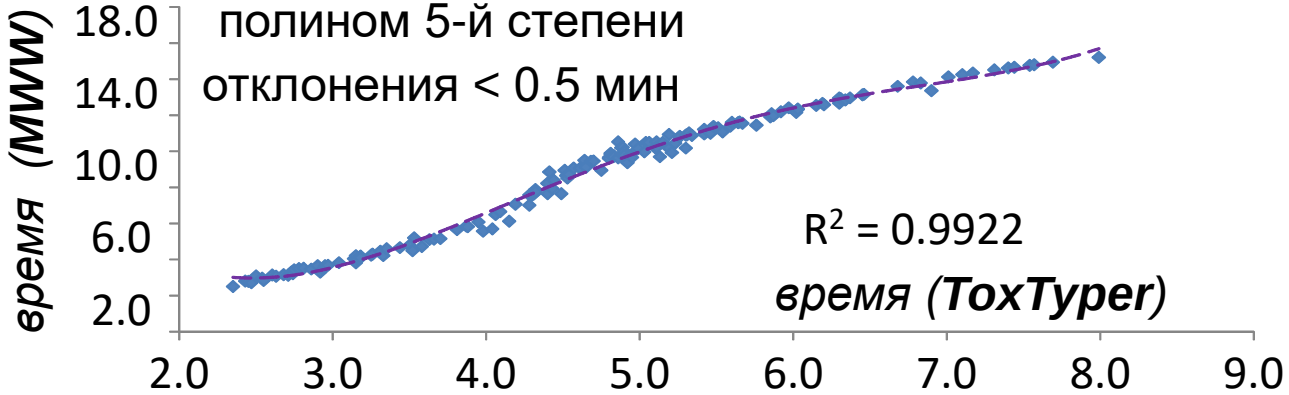
ITrap

H_2O – CH_3CN
(pH ~ 2.8)

ToxTyper
(Bruker Daltonics)
- «короткий» градиент
- неизмененные соединения

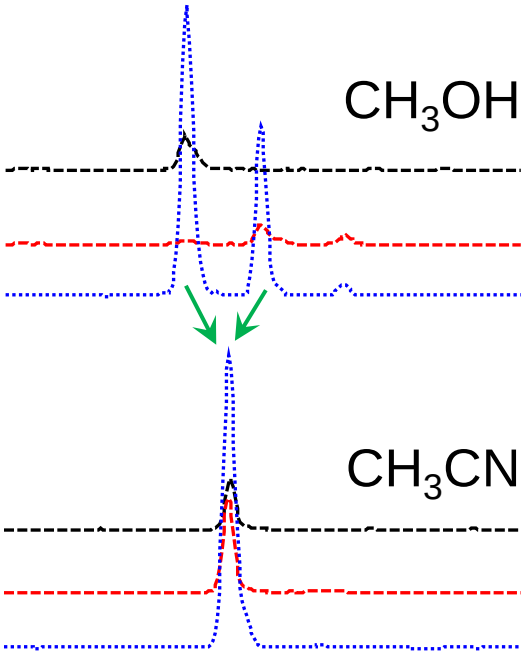
ToxTyper Long + MWW
(Maurer/Wissenbach/Weber)
- «длинный» (*2) градиент
- неизмененные соединения и метаболиты

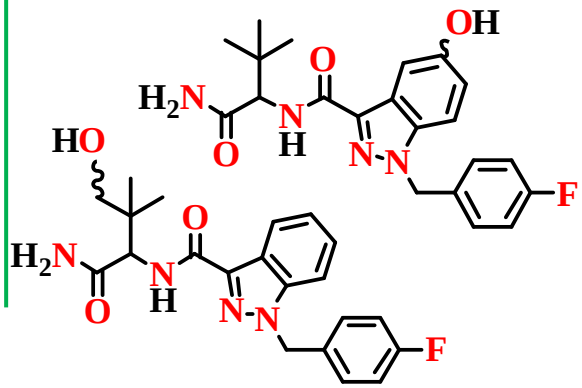




QTOF

H_2O – CH_3OH
(pH ~ 2.8)





Назначение библиотек, коррекции и дополнения

Toxtyper

Toxtyper_Long

MWW2014_Long

для обработки ион-хроматограмм с малым содержанием метаболитов

для совместной обработки ион-хроматограмм объектов со значительным содержанием метаболитов

дополнение характеристиками новых соединений

дополнение временами удерживания и спектрами MC^3

шаблон для специализированных анализов (массовые тестирования)