

Обработка хроматограмм биологических
объектов с использованием новых
возможностей АИПСИН

Григорьев А.М.

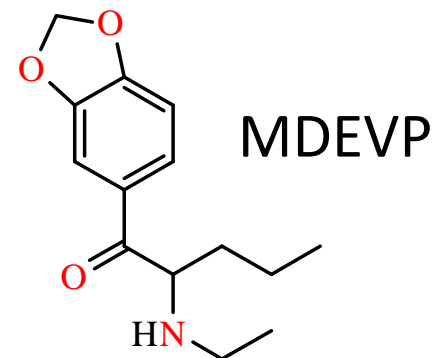
*ГБУЗ Московской области
«Бюро судебно-медицинской экспертизы»*

конец 2017 г

декларация о намерениях адаптации АИПСИН для обработки биохроматограмм

август 2018 г

предоставление судебно-химическому отделу СМЭ Московской области доступа к АИПСИН



2 октября 2019 г

Симпозиум «Вопросы идентификации наркотических средств в биопробах с использованием современных электронных библиотек масс-спектров и баз данных»

середина
октября 2019 г

выпуск обновлений, содержащих новый блок деконволюции

Хромато-масс-спектральный идентификатор

Версия: 1.2.1.0

Загрузка информации о библиотеках спектров

AiSIN
www.aipsin.com

This screenshot shows the main interface of the 'Хромато-масс-спектральный идентификатор' (Chromatography-mass spectrometry identifier) software. It features a 3D molecular model on the left, a central computer monitor displaying data, and a world map in the background. The interface is framed by a red border.

Масс-спектральный идентификатор

Изображения АИПСИН

Навигатор по наркотикам АИПСИН

Нормативные документы АИПСИН

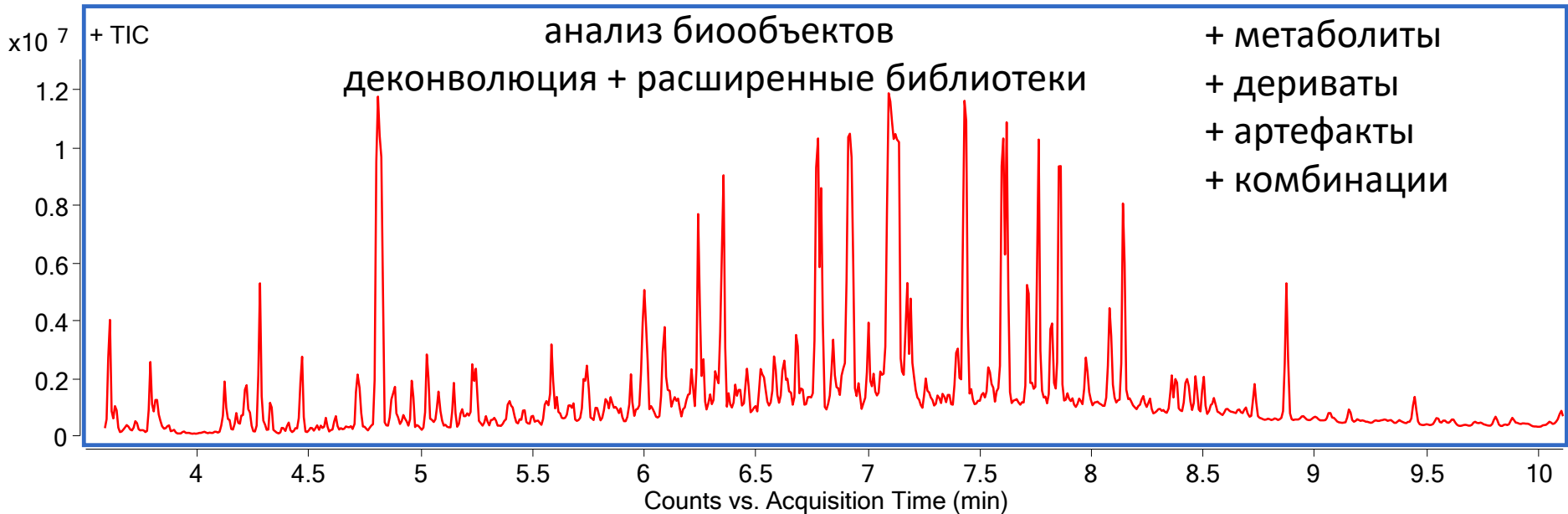
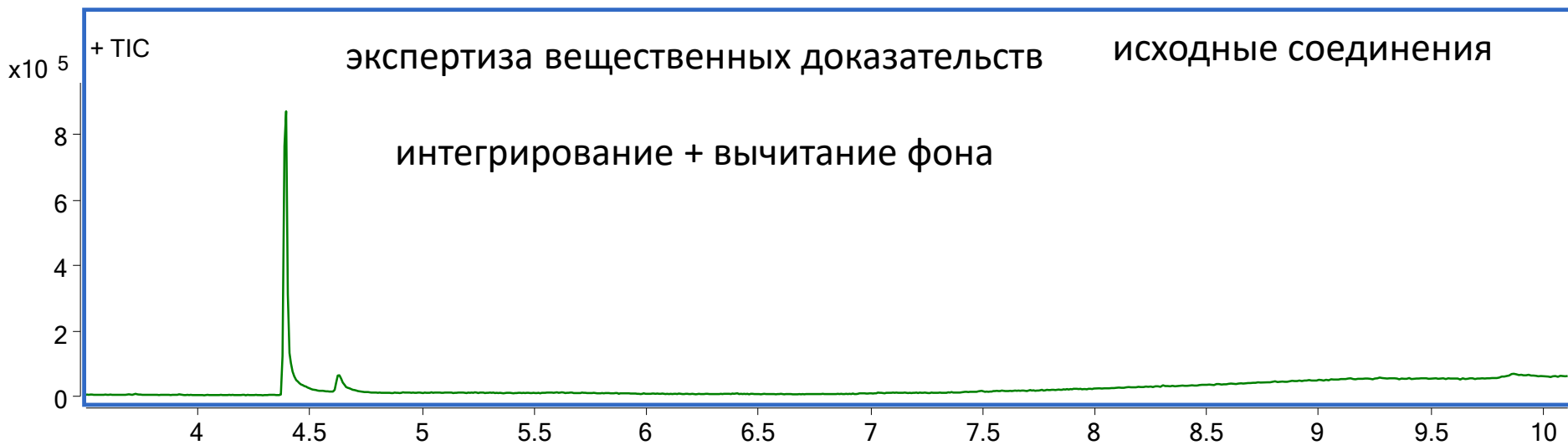
Обзор разделов

Поиск и отбор

Версия: 6.9.1.0

AiSIN
www.aipsin.com

This block displays a stack of six software interface screenshots, each with a unique title and the AiSIN logo. From top to bottom, the titles are: 'Масс-спектральный идентификатор', 'Изображения АИПСИН', 'Навигатор по наркотикам АИПСИН', 'Нормативные документы АИПСИН', 'Обзор разделов', and 'Поиск и отбор'. The bottom-most screenshot also includes the version number 'Версия: 6.9.1.0'.



Общие комментарии о хромато-масс-спектральном идентификаторе



Хромато-масс-спектральный идентификатор: F:\MS_data\Forg_AIPIN2\829u.D (2/9/2019 6:18:00 AM)

Калибровка RI: нет

сохраненные | внутр. стандарт | показывать калибровочную хроматограмму

Назад | Настройки хроматограммы | Не выявлено | Продолжить

Хроматограмма

Профили m/z

<input type="checkbox"/>	50
<input type="checkbox"/>	51
<input type="checkbox"/>	52
<input type="checkbox"/>	53
<input type="checkbox"/>	54
<input type="checkbox"/>	55
<input type="checkbox"/>	56
<input type="checkbox"/>	57
<input type="checkbox"/>	58
<input type="checkbox"/>	59

Интегрировать | Деконволюция | Без неизвестных | Показывать все совпадения

Пики на хроматограмме

ВУ	Библ.	MF	Вещество	Варианты
5.34	ЭкЛ	620	2С-Т-2	49 NIST
5.62	ЭкБ	590	1,4-Бутандиол...	54
5.67	ЭкБ	596	АМТ (альфа-ме...	51
6.22	ХтД	881	Никотин	167
6.83	ЭкД	605	Пропилгекседрин	147
6.89	ЭкЛ	626	2С-Т-2	52
7.08	ЭкЛ	648	Акрилоилфент...	64

Информация о веществе

2С-Т-2

RT: 5.336
 Start: 5.305
 End: 5.372
 Width: 0.067(4 с)
 Height: 4.05162e+007
 Half Mass T: 5.336
 Mass Center: 5.33857
 Area: 9.50637e+007

2С-Т-2
 MM = 241.35
 Брутто: C12H19NO2S
 Химическое название: 2-[4-(Этилтио)-2,5-диметоксифенил]-этанамин
 Молекулярный ион = 241

Идентификация пика

DD2017(6), MPWSe(3), sudmed(4), Вспом(0), ХтБ(0), ХтД(8), ХтЛ(5), ХтС(0), ЭкБ(9), ЭкД(9), ЭкЛ(1)

Библ.	MF	Вещество
ЭкЛ	620	2С-Т-2
ХтД	564	Золпидем 6-карбоновая ки...
ЭкБ	563	1-Пентилиндол
ХтЛ	560	Амфепрамон (Диэтилпроп...

Экспертно-криминалистическая Литературная (ЭкЛ)
 (DB-5MS) Masato Ogino, Taichi Naiki, Hitoshi Orui et al. Study of Method for Identifying Phenethylamine Drugs. Central Customs Laboratory (digitized by L.Kolosovskaya)

Сравнение спектров

Фикс. шкала | Экспорт

Экспертный вывод

Дериватизация: Нет | Биообразец

в отчет	ФП	Объект
<input checked="" type="checkbox"/>	90%	1,4-Бутандиол 2TMS
<input checked="" type="checkbox"/>	90%	Тиглоилфентанил
<input checked="" type="checkbox"/>	90%	3-(3,5-Диметилфенил)хиназолин-4(3H)-он
<input checked="" type="checkbox"/>	90%	3,6-Дидезоксидигидронорморфин
<input checked="" type="checkbox"/>	90%	Трамадол TMS
<input checked="" type="checkbox"/>	90%	N-Дезметилтрамадол 2TMS
<input checked="" type="checkbox"/>	90%	O-Дезметилтрамадол 2TMS

Индивидуальные вещества

Диокилфталат: идентифицировано в образце

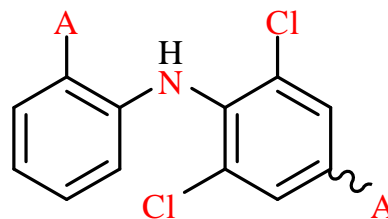
Объекты контролируемого оборота (0) | Литература

версия базы структур: 316.0

Текущая версия базы данных структурных формул: 316.0

Название	Последнее обновление	Версия базы структур	Всего спектров	Со структурами	Импортировано	Известных веществ	Неизвестных веществ
DD2017 (DD2017)	10/16/2019 11:16:47 AM	316.0	25114	25114	10375	7031	12158
MPW5e (MPW5e)	10/16/2019 11:20:54 AM	316.0	10430	10137	2812	2656	6936
sudmed-ms_2277_mistlib_20190928 (sudmed-ms_2277_mistlib_20190928)	10/16/2019 9:52:39 AM	316.0	2277	1472	1413	1100	51

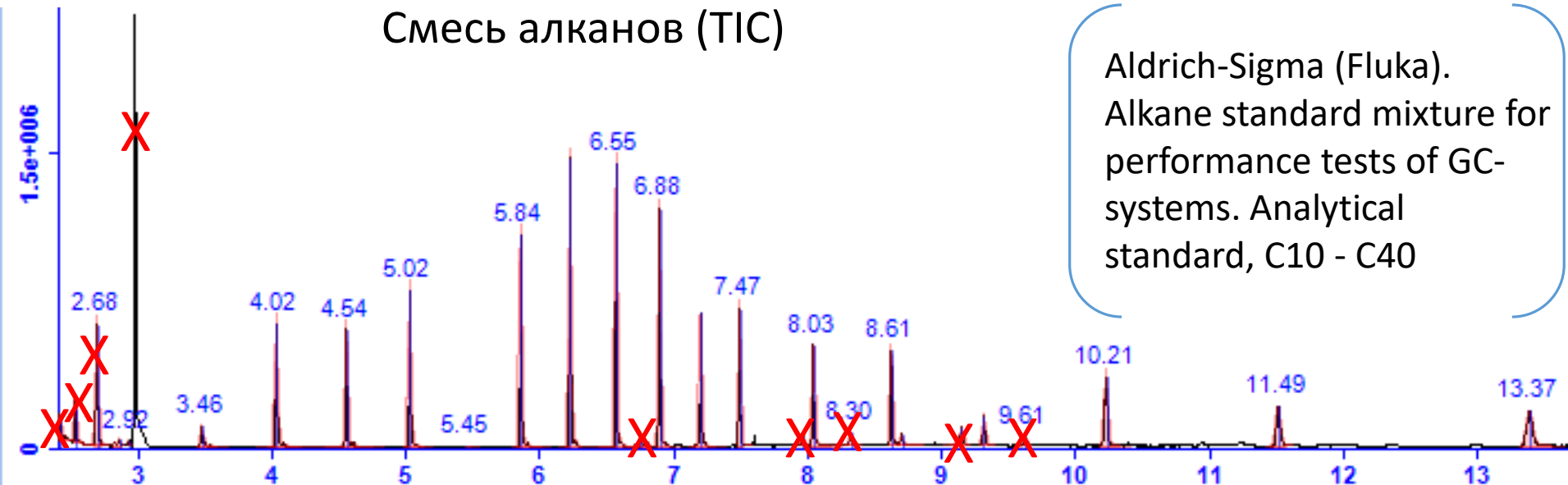
Название	Всего спектров	Со структурами	Импортировано	Известных веществ	Неизвестных веществ
DD2017	25114	25114 100 %	10375 41 %	7031 37 %	12158 63 %
MPW5e	10430	10137 97 %	2812 27 %	2656 28 %	6936 72 %
SUDMED-MS_2277	2277	1472 64 %	1413 62 %	1100 96 %	51 4%



(метаболит/артефакт диклофенака (MPW5e))

Смесь алканов (TIC)

Aldrich-Sigma (Fluka).
Alkane standard mixture for
performance tests of GC-
systems. Analytical
standard, C10 - C40



Принятый способ обнаружения алканов: интегрирование пиков в TIC при игнорировании их спектров.

При использовании самодельных смесей алканов необходима коррекция с помощью сторонних программ (AMDIS, MSD ChemStation и пр.)

Пики на хроматограмме

ВУ	Библ.	MF	ИУ пика	ИУ-ИУ би...	Вещество
7.77	ХтД	927	2106		Котинин
7.99	ЭкБ	883	2187	+385 (0%)	α-PVP (α-Пирролидинопентиофенон)
8.61	DD...	821	2401		Дибутилфталат
8.73	ХтД	891	2435	+459 (0%)	Трамадол TMS
8.93	ЭкД	867	2494	+455 (0%)	О-Дезметилтрамадол 2TMS
10.46	DD...	920	2838		Кодеин TMS
10.53	DD...	902	2850		Диоктилфталат
10.97	ХтД	830	2917		6-Моноацетилморфин TMS

Фрагмент библиотеки MPW5e,
поле индексов

```

MPW5e — Блокнот
Файл  Правка  Формат  Вид  Справка
Name: Codeine TMS P1320
Synon: Codeine TMS
Formula: C21H29NO3Si
MW: 371
RI: 2520
Comment: Potent antitussive |RI:2520|
Num Peaks: 272

```

Оценка работы блока деконволюции

Автоматическая деконволюция



AMDIS

Поиск соединений
на хроматограмме



АИПСИН

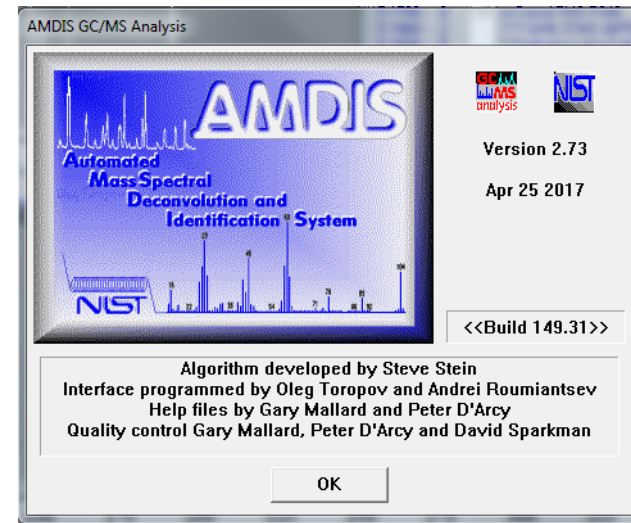
Поиск соединений,
найденных AMDIS.

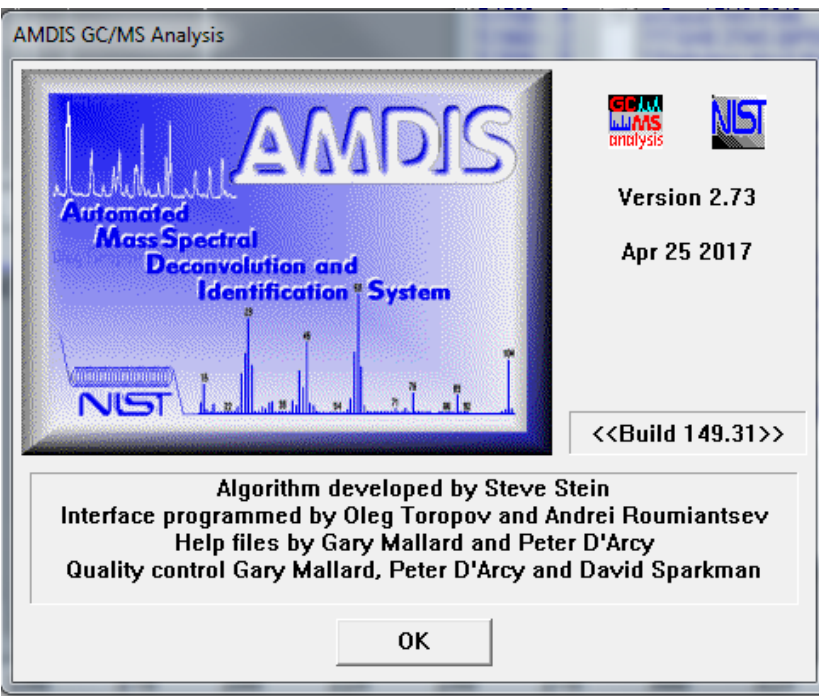
Интегратор TIC

АИПСИН

Поиск соединений,
найденных AMDIS.

Деконволюция





библиотека: MPW5e

библиотеки: внутренние + импортированные

Identif.	Instr.	Deconv.	Libr.	QA/QC	Scan Sets	Filter
<div style="border: 1px solid gray; padding: 5px;"> <input type="text" value="12"/> Component width <input type="checkbox"/> Omit m/z </div>						
<div style="border: 1px solid gray; padding: 5px;"> Adjacent peak subtraction: <input type="text" value="One"/> </div>						
<div style="border: 1px solid gray; padding: 5px;"> Resolution: <input type="text" value="Low"/> </div>						
<div style="border: 1px solid gray; padding: 5px;"> Sensitivity: <input type="text" value="Very High"/> </div>						
<div style="border: 1px solid gray; padding: 5px;"> Shape requirements: <input type="text" value="Low"/> </div>						

Библиотечный поиск	
Минимальное значение MF	500
Минимальное кол-во общих линий спектра	5
Минимальное значение m/z	30
Максимальное значение m/z	600
Интегрирование	
Минимальная ширина пика, с	3
Минимальное отношение сигнал/шум пика	10
Разделение пиков	<input checked="" type="checkbox"/>
Автоматическая деконволюция	<input type="checkbox"/>
Оставлять неидентифицированные пики	<input checked="" type="checkbox"/>

Всего хроматограмм → **71**

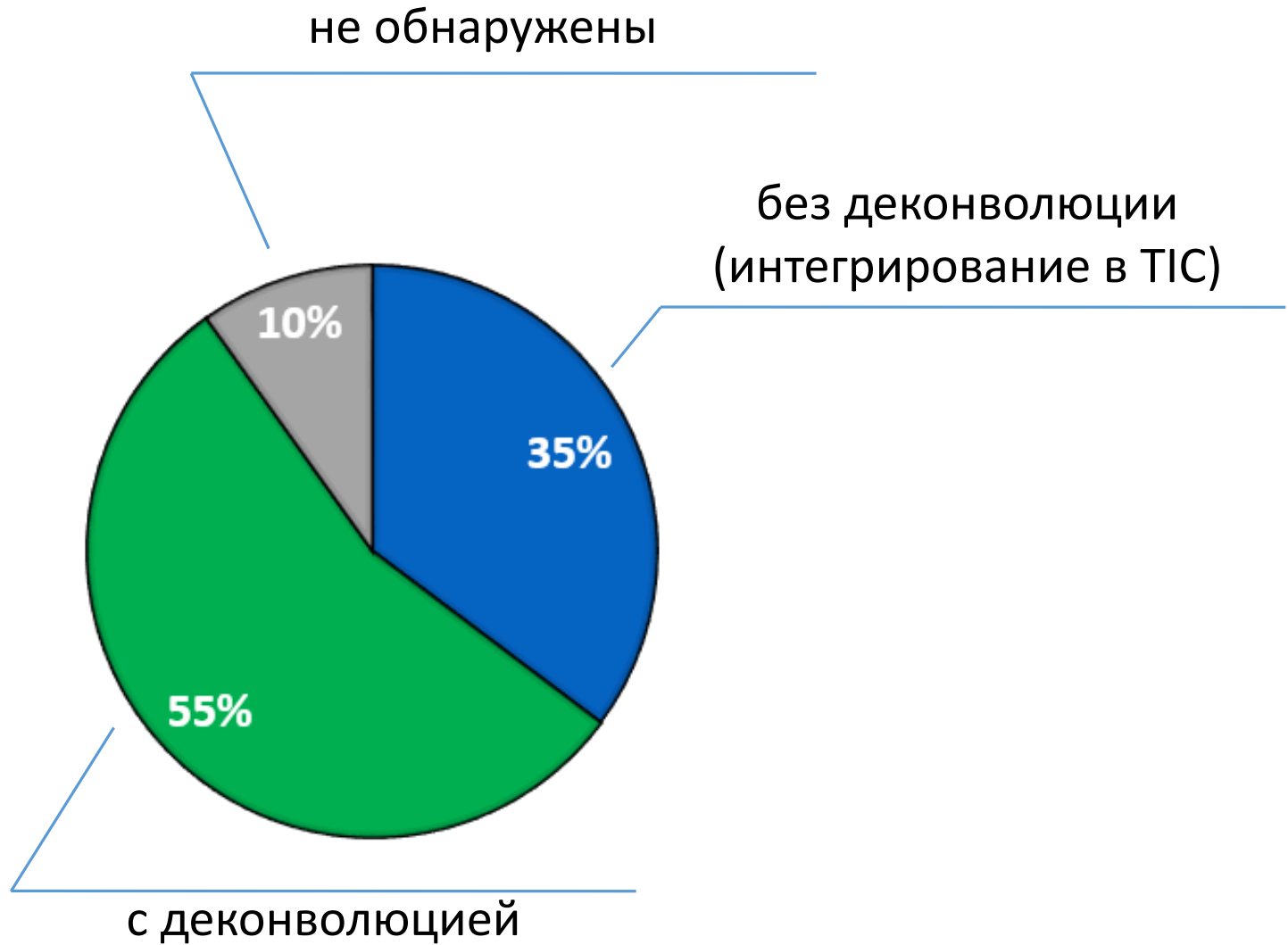
Объектов → **7**

моча	кровь	желчь	печень	почка	волосы	ногти
59	3	4	2	1	1	1

Всего обнаружений (AMDIS) → **264**

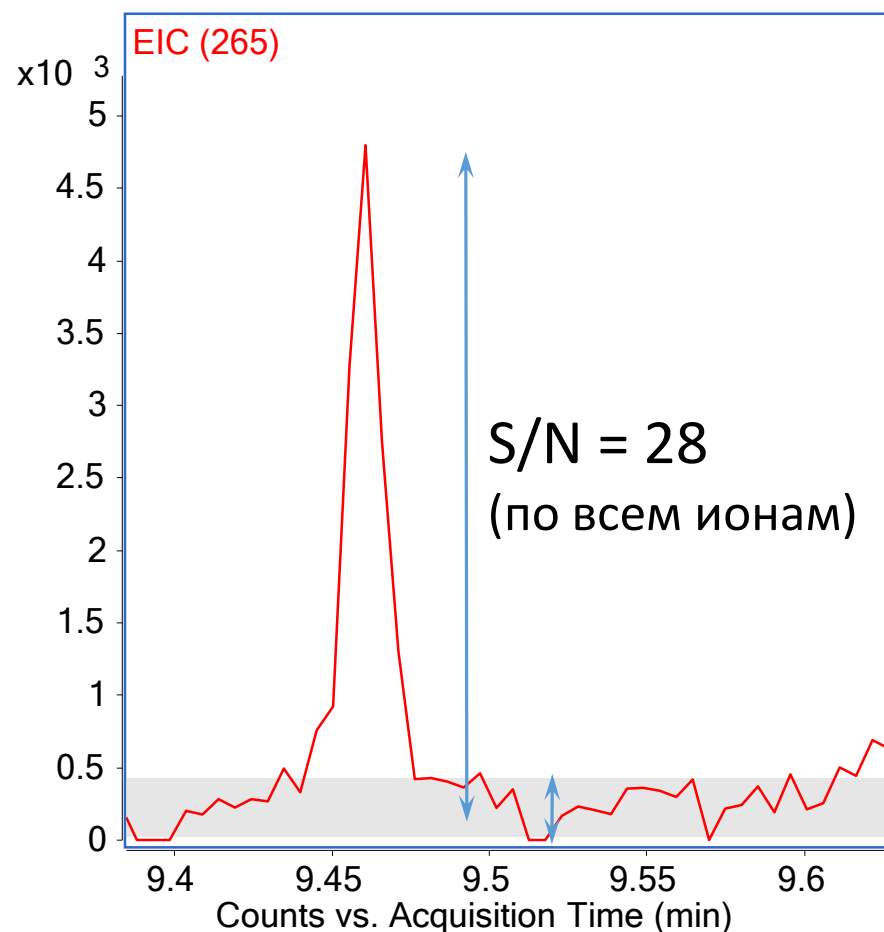
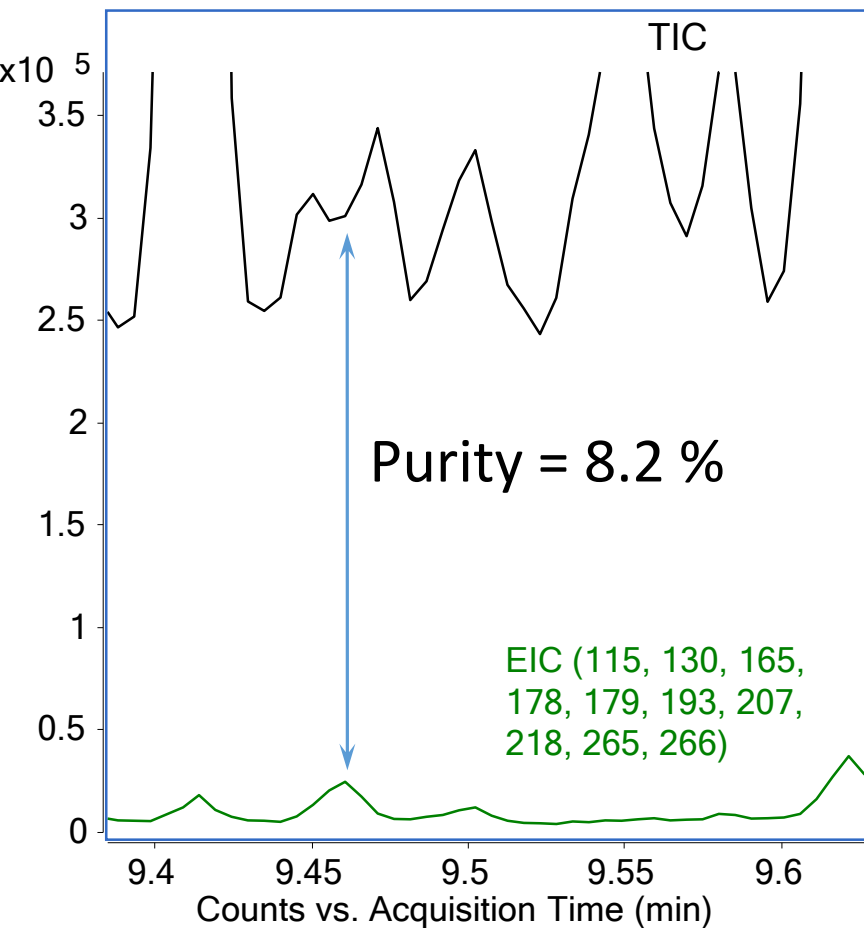
Обнаружено веществ (AMDIS) → **72**

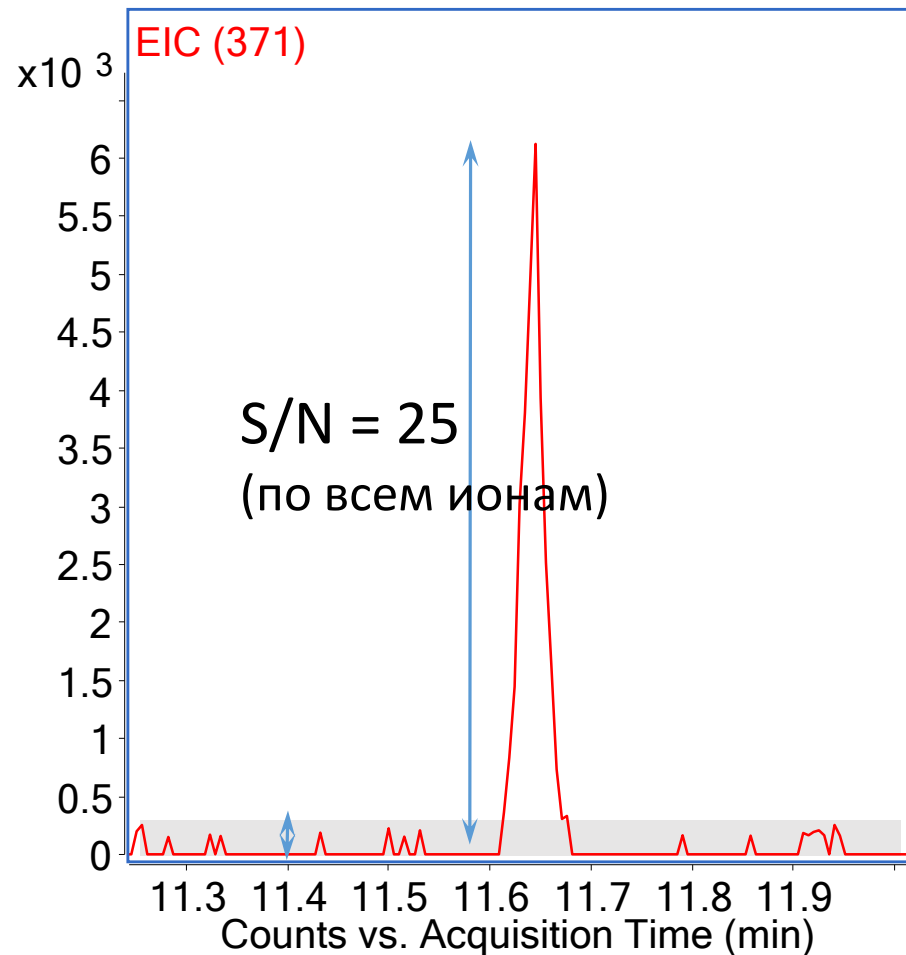
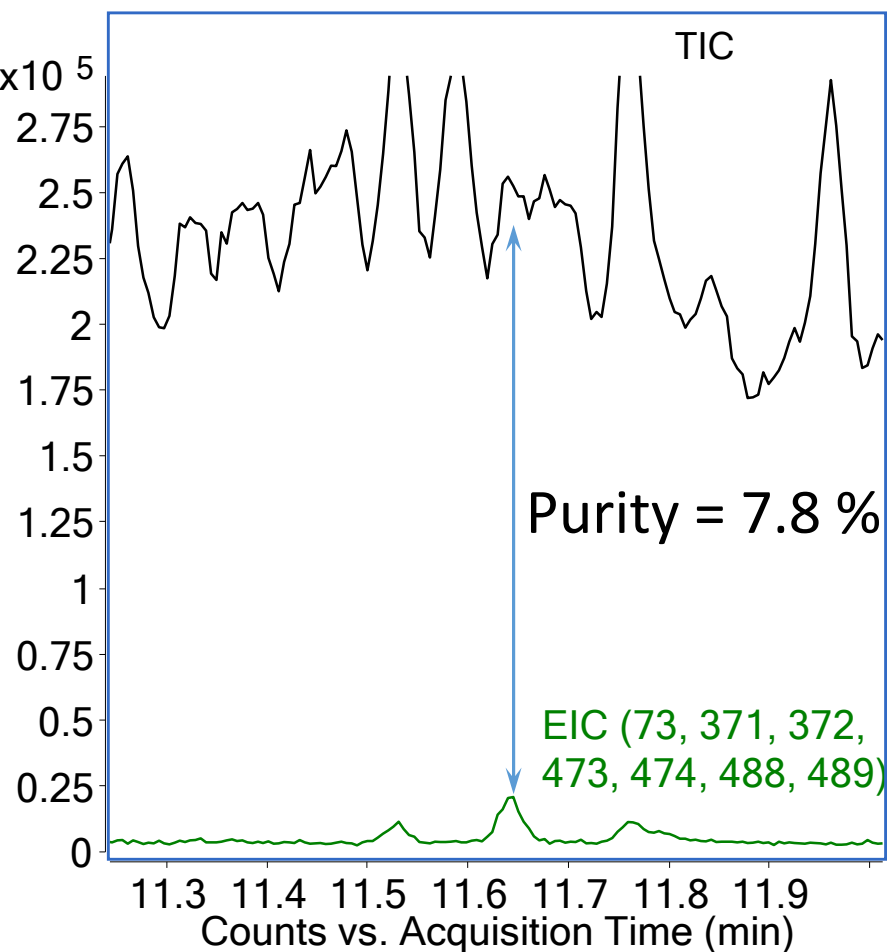
Из них отсутствуют в библиотеках АИПСИН (внутренних и внешних) → **9 (13 %)**

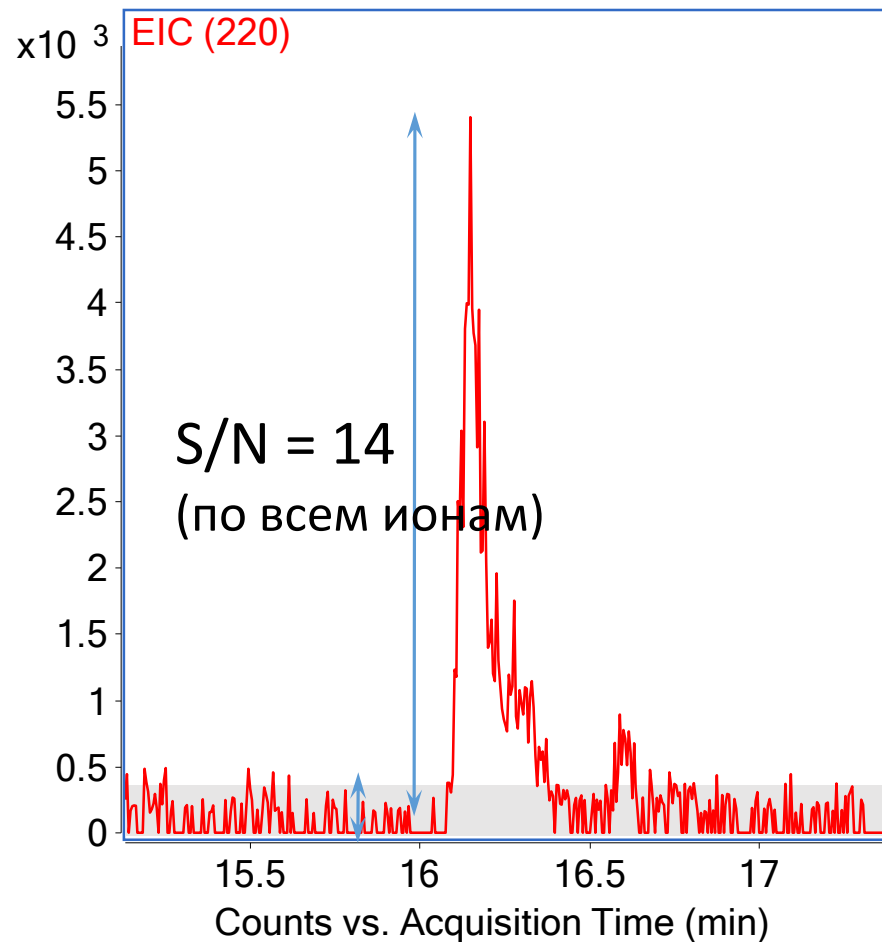
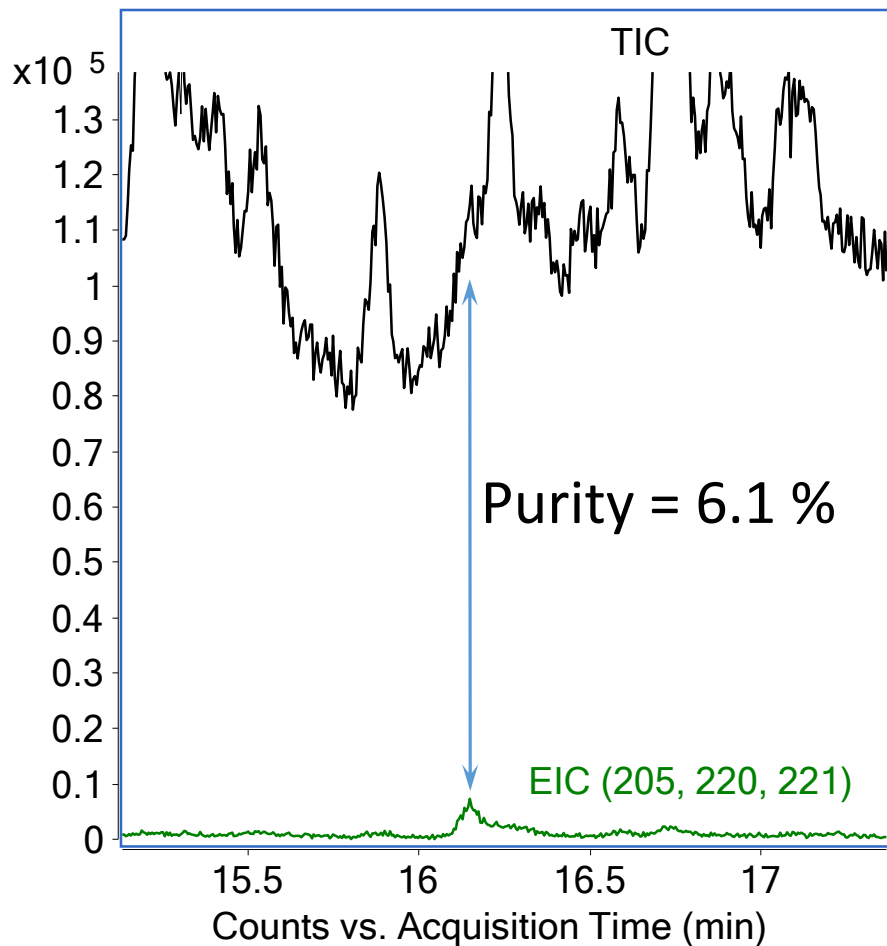


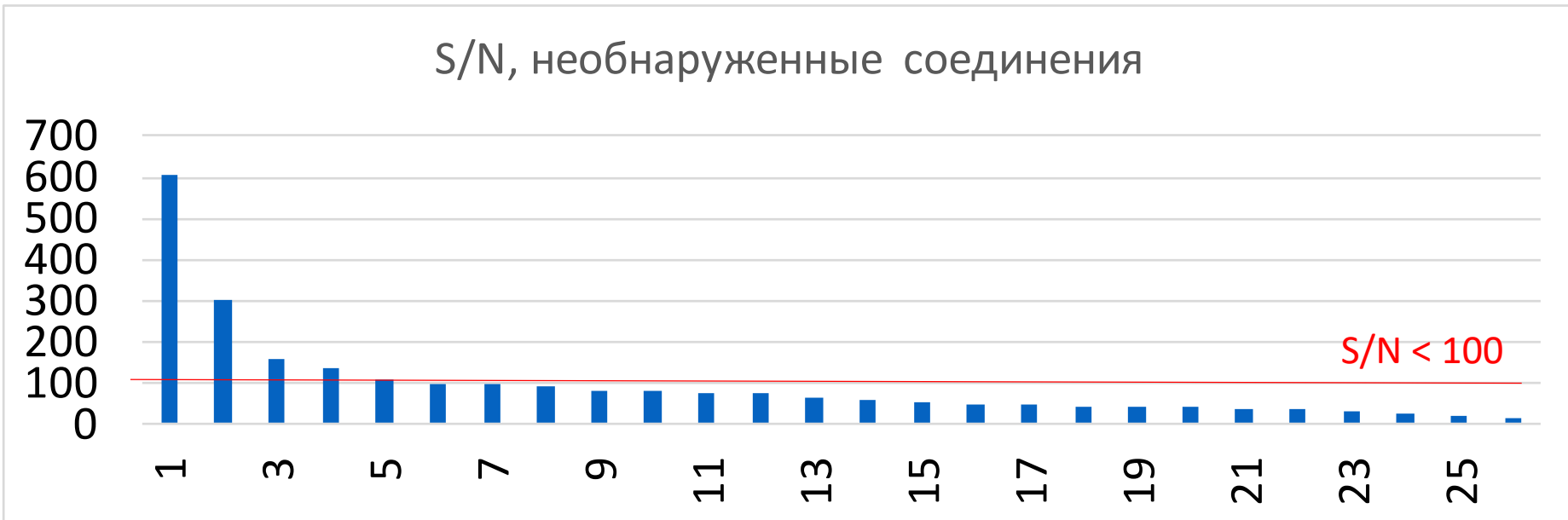
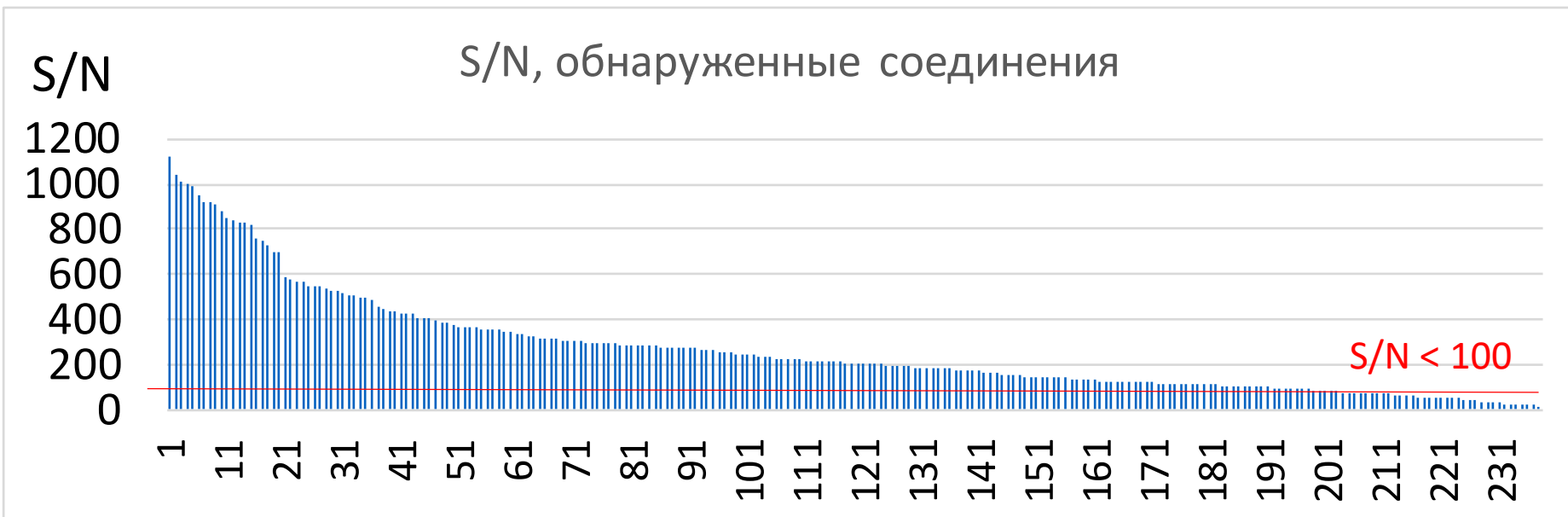
Метадон-М/артефакт

Component:	Match:
Width = 2.7 scans	Net = 81
Purity = 8.2%	Weighted = 90
Model = 265 m/z	Simple = 60
Min. Abund. = 6.0%	Reverse = 88
Amount = 0.0107%	Corrections:
Scan = 843	RETENTION = n/a
Peak Tailing = 1.0	uncertain pks = -7.5
S/N (total) = 28	reverse logic = 2.3
...	...



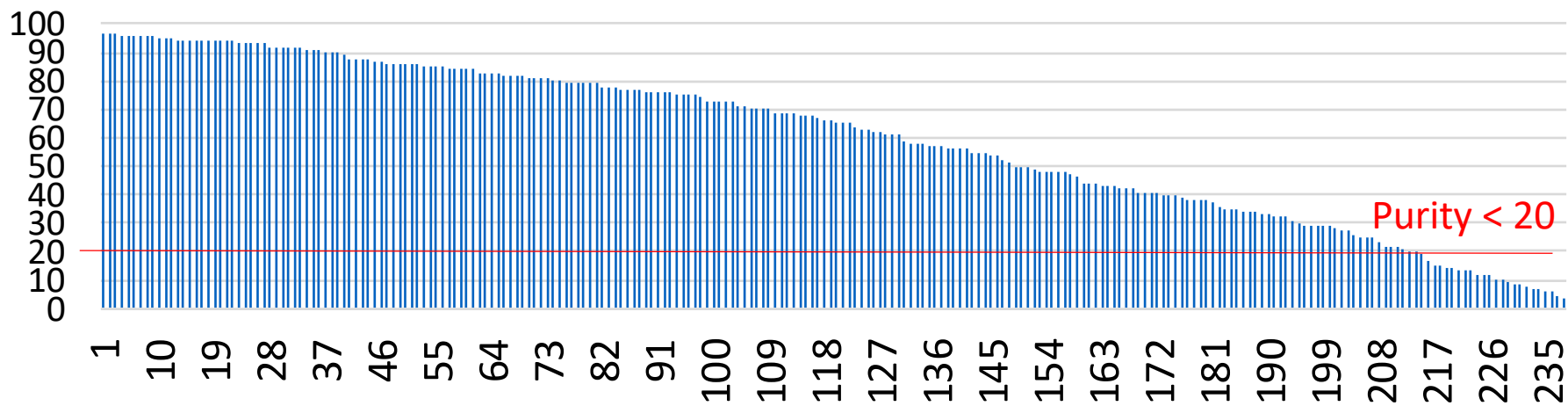




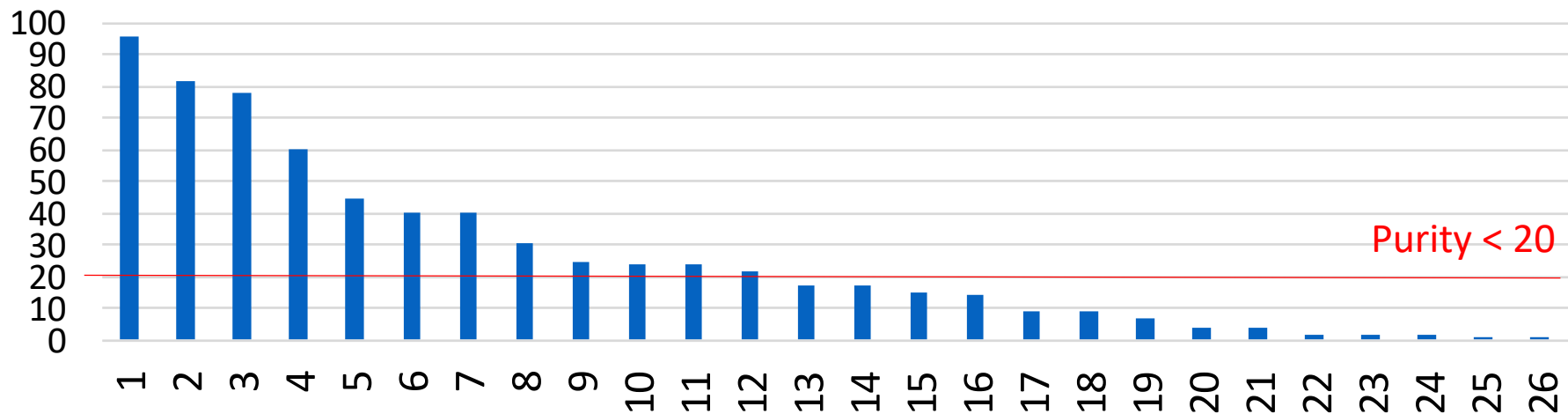


Purity

Purity, обнаруженные соединения



Purity, необнаруженные соединения



Заключение

1. Интерфейс системы крайне неудобен для работы
2. Импорт сторонних библиотек ограничен. Это может приводить к значительному числу ложноотрицательных заключений, а невозможность импорта параметров удерживания – к повышению риска ложноположительных.
3. Реализация процедуры деконволюции значительно расширяет возможности системы, позволяя обнаруживать малые количества тематических соединений

