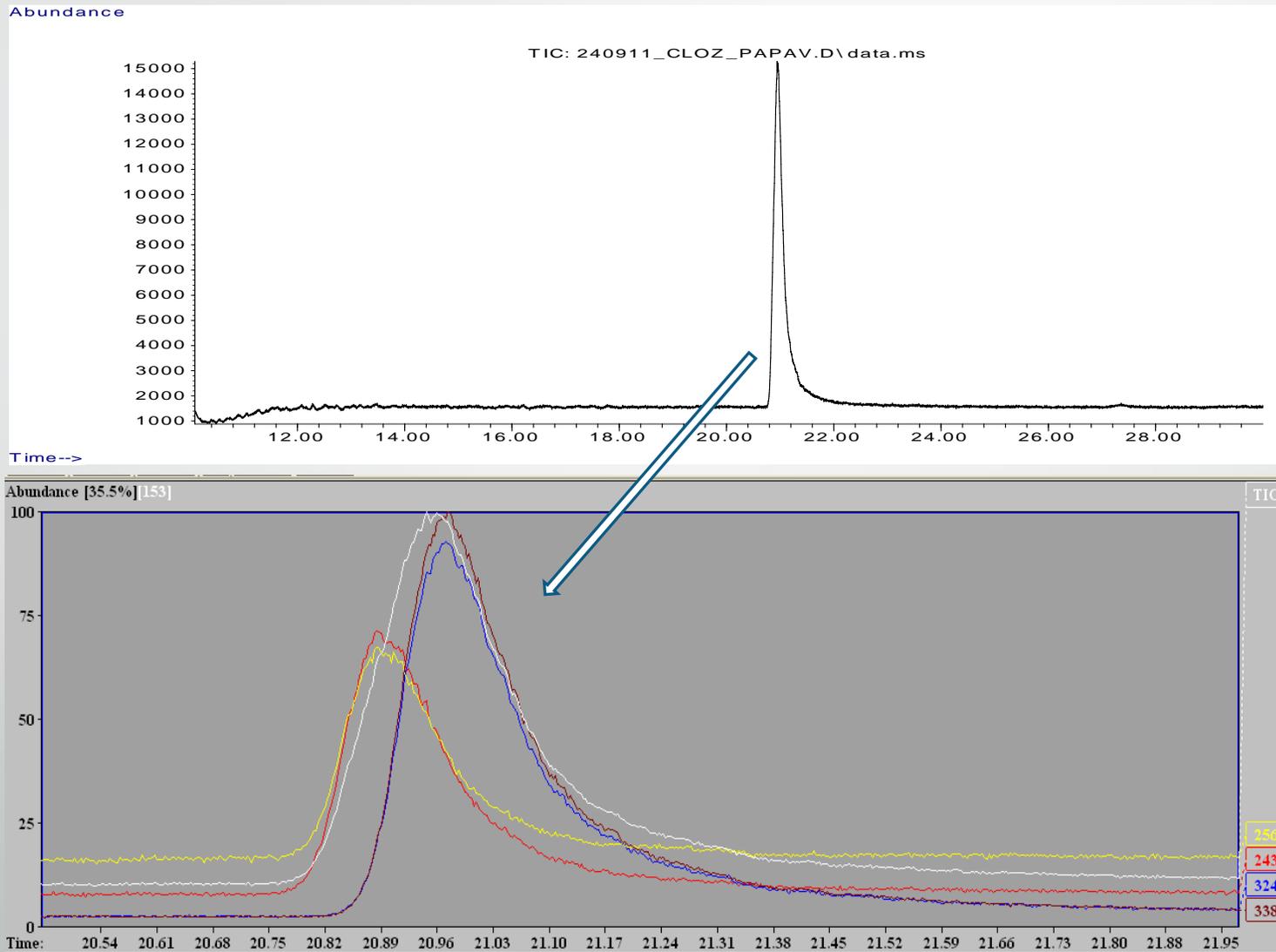


Опыт использования библиотек масс-спектров в практике ХТЛ Свердловской области

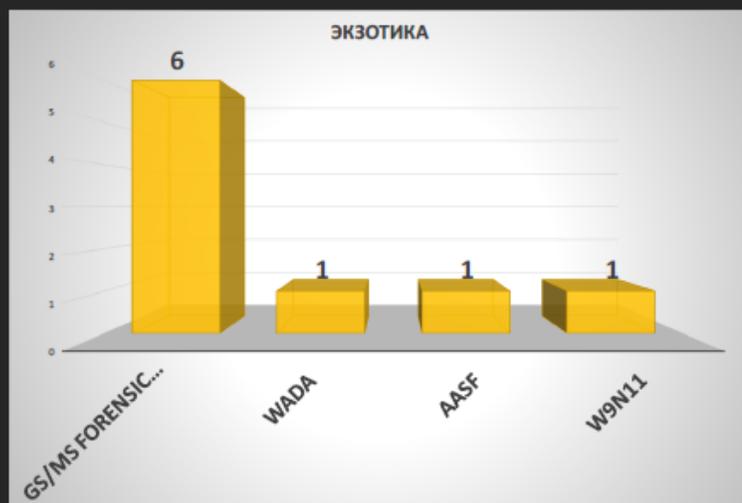
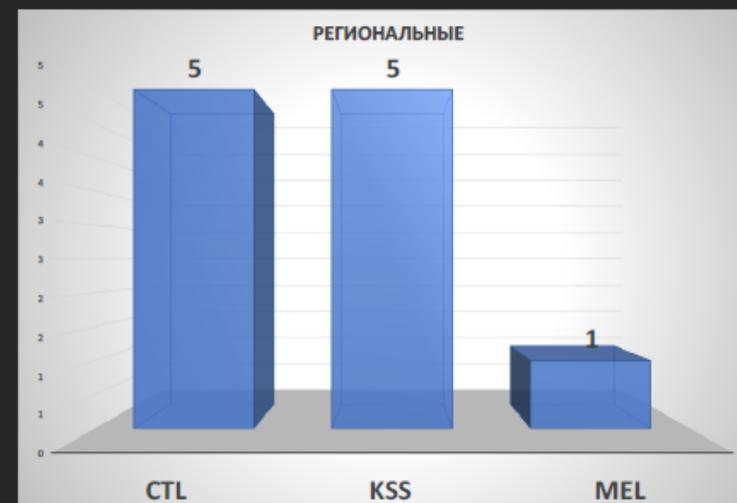
Гофенберг М.А,
заведующая ХТЛ ГАУЗ СО ОНБ,
провизор-аналитик ХТЛ ГБУЗ СО СОКПБ

Санкт-Петербург,
ноябрь 2019

Использование программы автоматической деконволюции при наложении хроматографических пиков азалептина и папаверина



Региональные библиотеки



Библиотеки масс-спектров электронной ионизации низкого разрешения, используемые в практике ХТЛ Свердловской области



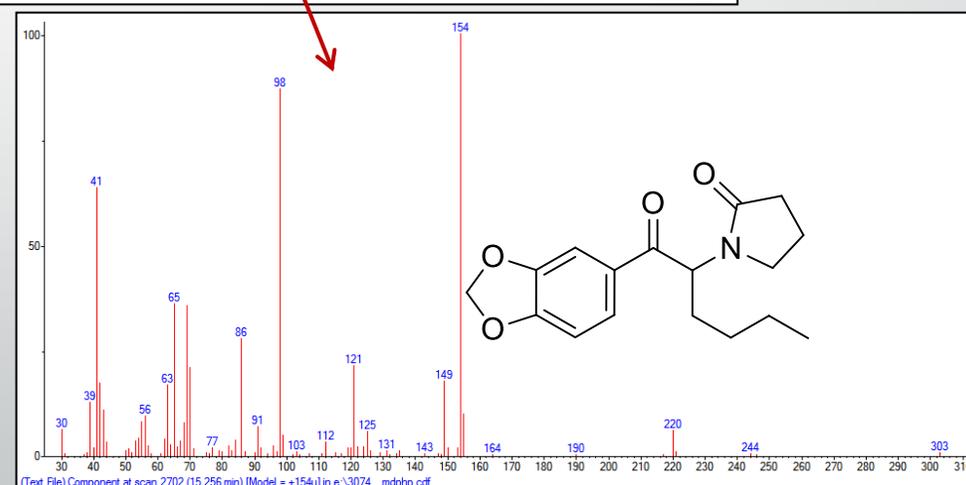
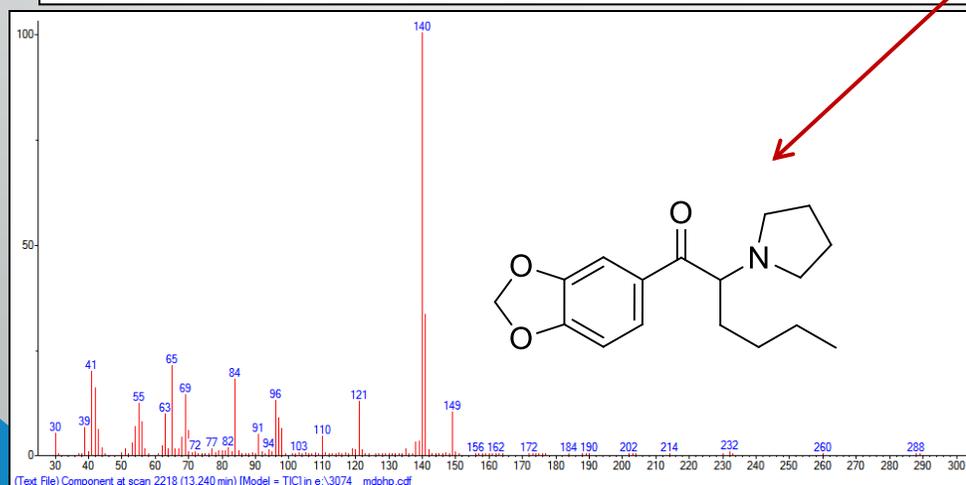
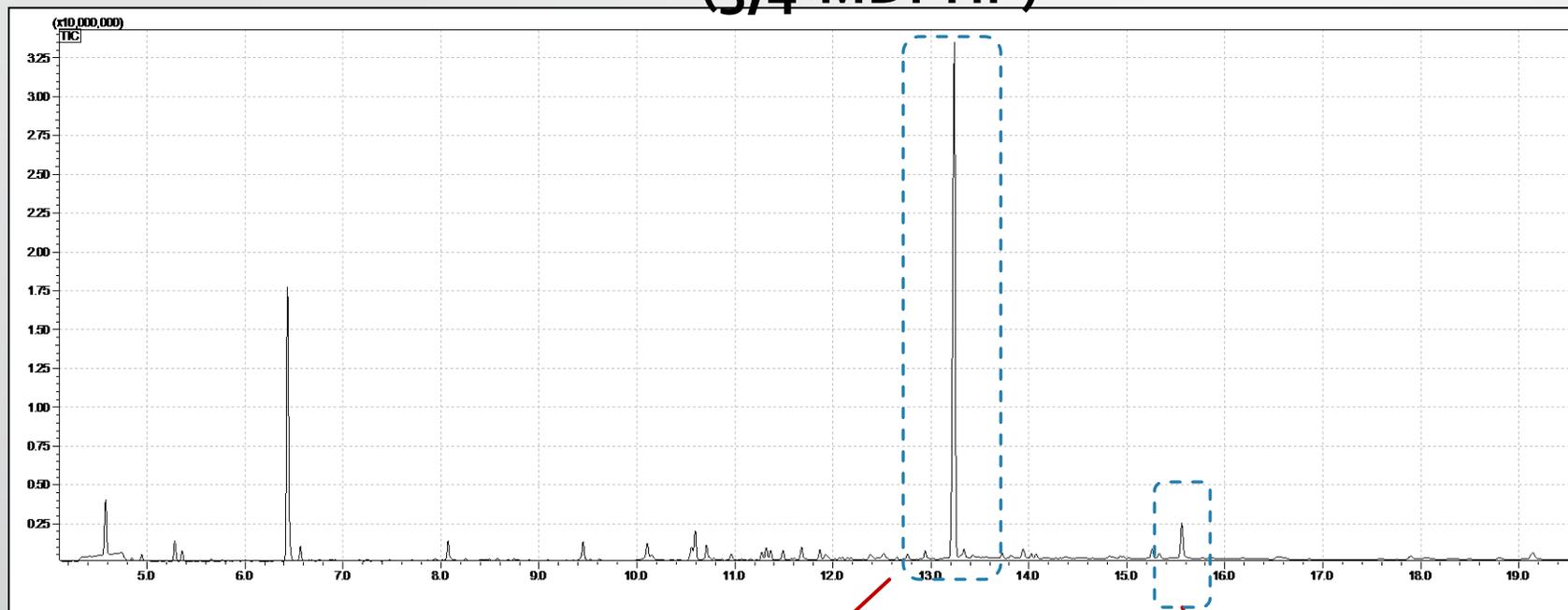
- CTL
- NIST
- EKBDRUGS
- SUDMED
- MPW
- DD
- Forensic Toxicological Database (Shimadzu)

CTL

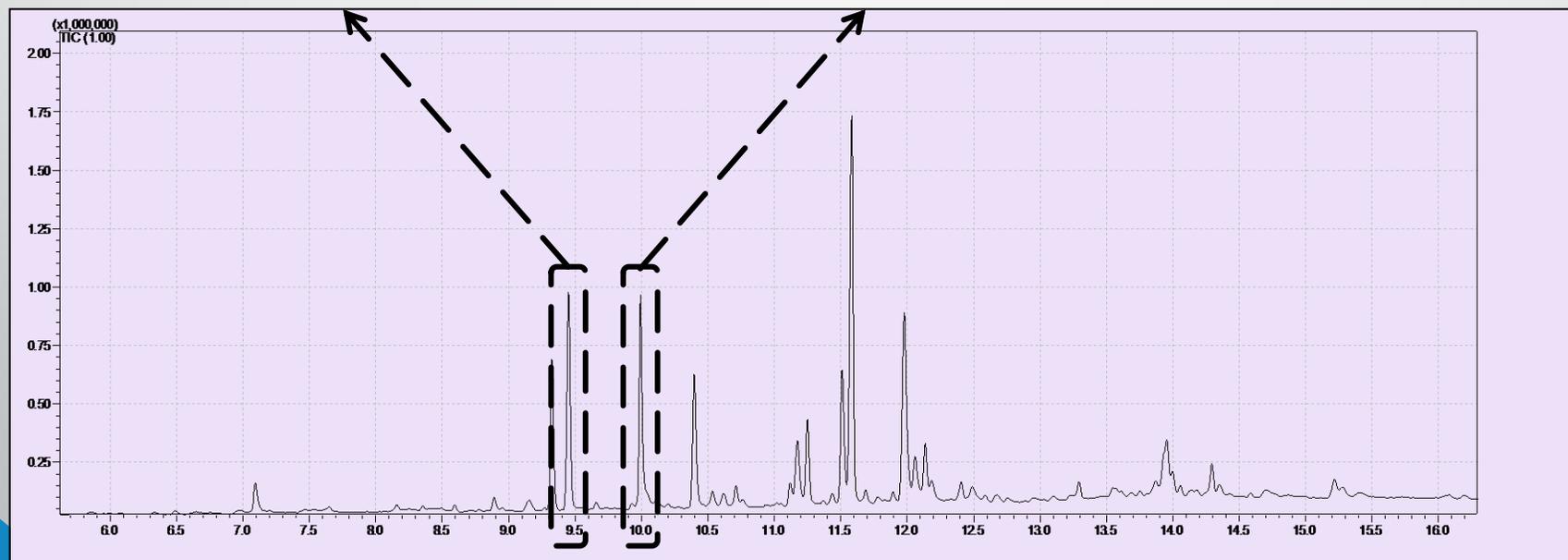
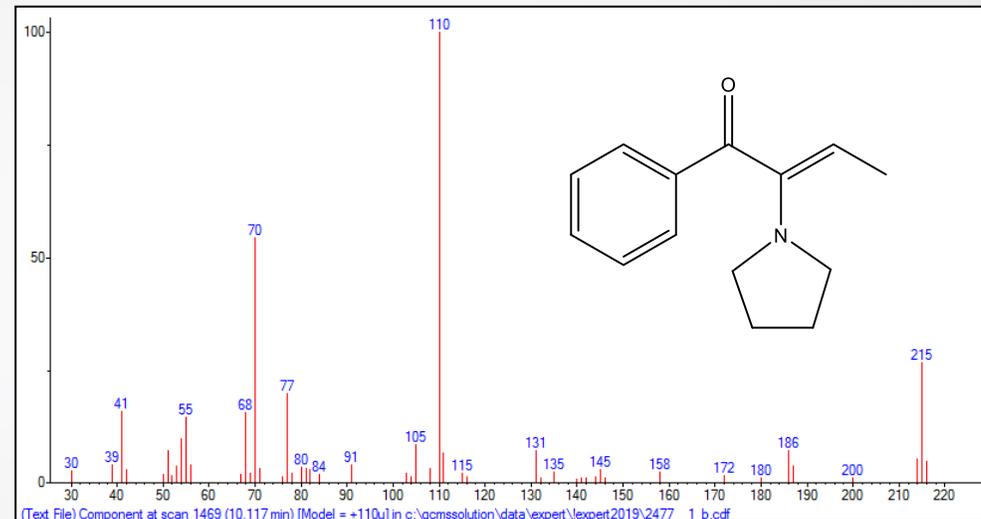
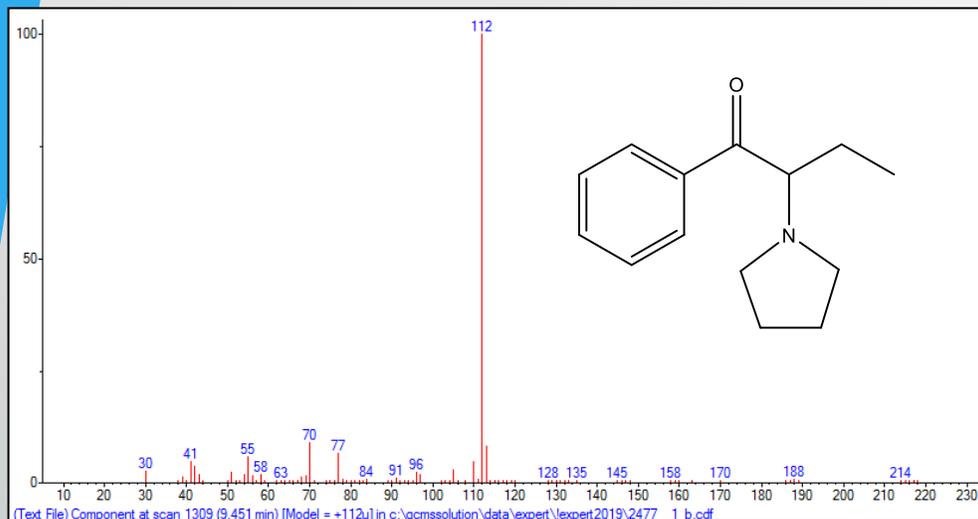
- включает масс-спектры электронной ионизации низкого разрешения наркотических, психоактивных, лекарственных веществ, пестицидов и их метаболитов в нативном виде, а также триметилсилильных, метильных, ацетильных, трифторацетильных и пентафторацетильных дериватов, дериватов с хлорформиатами, фоновых и соэкстрактивных веществ, встречающихся в биологических пробах, биологически активных соединений, также некоторых артефактов;
- составлена при химико-токсикологическом анализе реальных биологических образцов;
- с учетом особенностей распространения токсических, наркотических или иных новых психоактивных соединений в Уральском регионе.
- Библиотека регулярно обновляется
- Библиотека **бесплатна!!!**



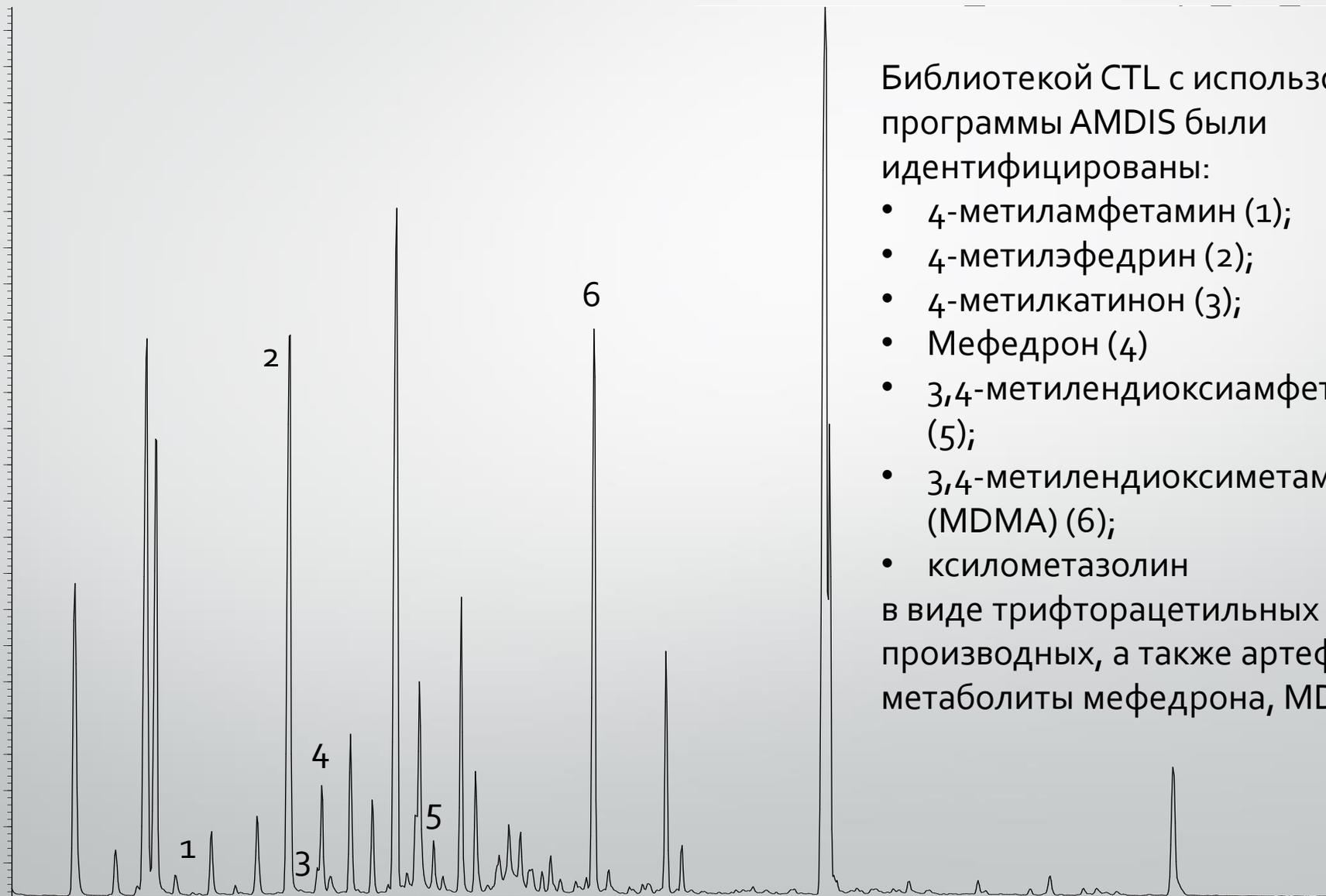
3,4-метилendioкспирролидиногексанофенон (3,4-MDPHP)



α-пирролидинобутирофенон (α-PBP)



Обнаружение и идентификация катинонов



Библиотекой CTL с использованием программы AMDIS были идентифицированы:

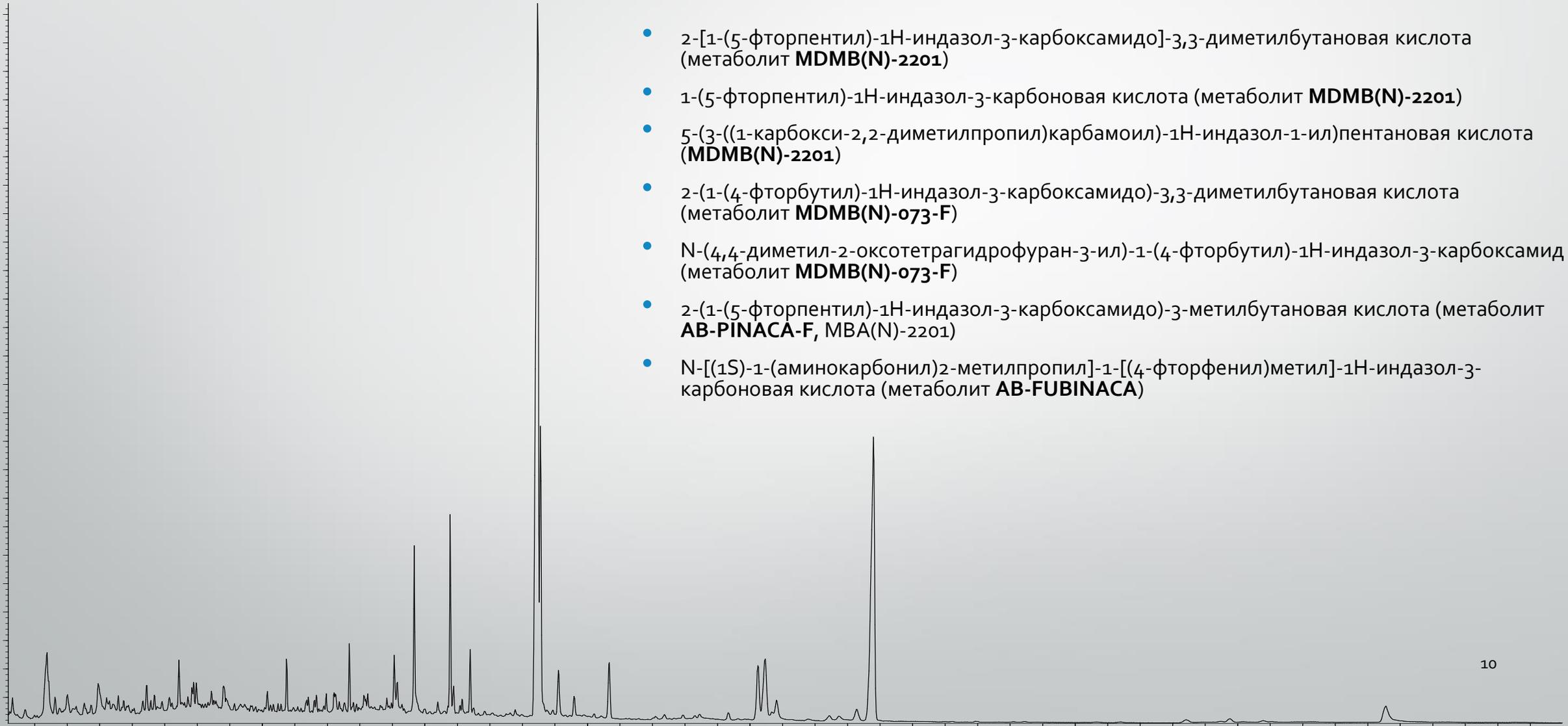
- 4-метиламфетамин (1);
- 4-метилэфедрин (2);
- 4-метилкатинон (3);
- Мефедрон (4)
- 3,4-метилendioксиамфетамин (MDA) (5);
- 3,4-метилendioксиметамфетамин (MDMA) (6);
- ксилометазолин

в виде трифторацетильных производных, а также артефакты и метаболиты мефедрона, MDA и MDMA

Идентифицировано в автоматическом режиме

	AMDIS (EKBDRUGS)	АИПСИН
	313 соединений обнаружено	обнаружено 78 соединений
RT 5,77	4-метиламфетамин ТФА (MF - 92)	4-метиламфетамин ТФА (как единственный кандидат - спектр грязный, не вычищен программой деконволюции, MF 702) - не надежно
RT 6,78	Мефедрон ТФА (MF - 99)	4-меткатинон ТФА (MF 907 - 28 кандидатов, в спектре 5 ионов, интенсивных 3)
RT 7,07	Мефедрон ТФА (MF - 99)	Мефедрон ТФА (MF - 902)
RT 7,58	3,4-МДА ТФА (MF - 99)	3,4-МДА ТФА (MF - 99) (спектры EKBDRUGS)
RT 8,34	3,4-МДМА ТФА (MF - 99)	3,4-МДМА ТФА (MF - 99) (спектры EKBDRUGS)

Обнаружение и идентификация синтетических каннабимиметиков



- 2-[1-(5-фторпентил)-1H-индазол-3-карбоксамидо]-3,3-диметилбутановая кислота (метаболит **MDMB(N)-2201**)
- 1-(5-фторпентил)-1H-индазол-3-карбоновая кислота (метаболит **MDMB(N)-2201**)
- 5-(3-((1-карбокси-2,2-диметилпропил)карбамоил)-1H-индазол-1-ил)пентановая кислота (**MDMB(N)-2201**)
- 2-(1-(4-фторбутил)-1H-индазол-3-карбоксамидо)-3,3-диметилбутановая кислота (метаболит **MDMB(N)-073-F**)
- N-(4,4-диметил-2-оксотetraгидрофуран-3-ил)-1-(4-фторбутил)-1H-индазол-3-карбоксамид (метаболит **MDMB(N)-073-F**)
- 2-(1-(5-фторпентил)-1H-индазол-3-карбоксамидо)-3-метилбутановая кислота (метаболит **AB-PINACA-F**, MBA(N)-2201)
- N-[(1S)-1-(аминокарбонил)2-метилпропил]-1-[(4-фторфенил)метил]-1H-индазол-3-карбоновая кислота (метаболит **AB-FUBINACA**)

Идентифицировано в автоматическом режиме

- AMDIS / EKBDRUGS 18 – обнаружено **377** соединений, достоверно идентифицированы
 - MMB(N)-2201 (MF 98 - RT15.31),
 - MDMA(N)-2201 (MF 100 - RT15.52),
 - MMB(N)-Bz-F (MF 96 - RT19.37).
- АИПСИН - обнаружено **15** соединений.
 - Метил 1-(5-фторпентил)-1H-индазол-3-карбоксилат (QCBL(N)-2201-M marker, methyl) (MF 912 - RT 10.56 - метаболит маркер - 6 кандидатов);
 - MDMA(N)-073-F (MF 892 - RT 14.19 - 11 кандидатов);
 - MDMA(N)-2201 (MF 955 - RT15,52- 34 кандидата).
 - Просмотр спектров остальных кандидатов не возможен. Если изменить настройки, заданные по умолчанию, появляется возможность увидеть «минорные» вещества - количество соединений в этом случае составляет порядка 50 соединений.

Библиотека DesDrugs2013, масс-спектры N-этилкатинона

Name: Ethcathinone

Formula: C₁₁H₁₅NO

MW: 177 Exact Mass: 177.115364 CAS#: 51553-17-4 ID#: 1549 DB: dd2013

Other DBs: None

Comment: Designer drug QI:867 VI:2 DigiLab GmbH (C) 2013

10 largest peaks:

72 999 | 44 426 | 77 134 | 73 80 | 42 61 |
105 60 | 51 59 | 56 37 | 70 36 | 50 16 |

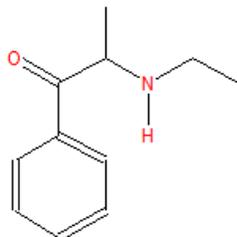
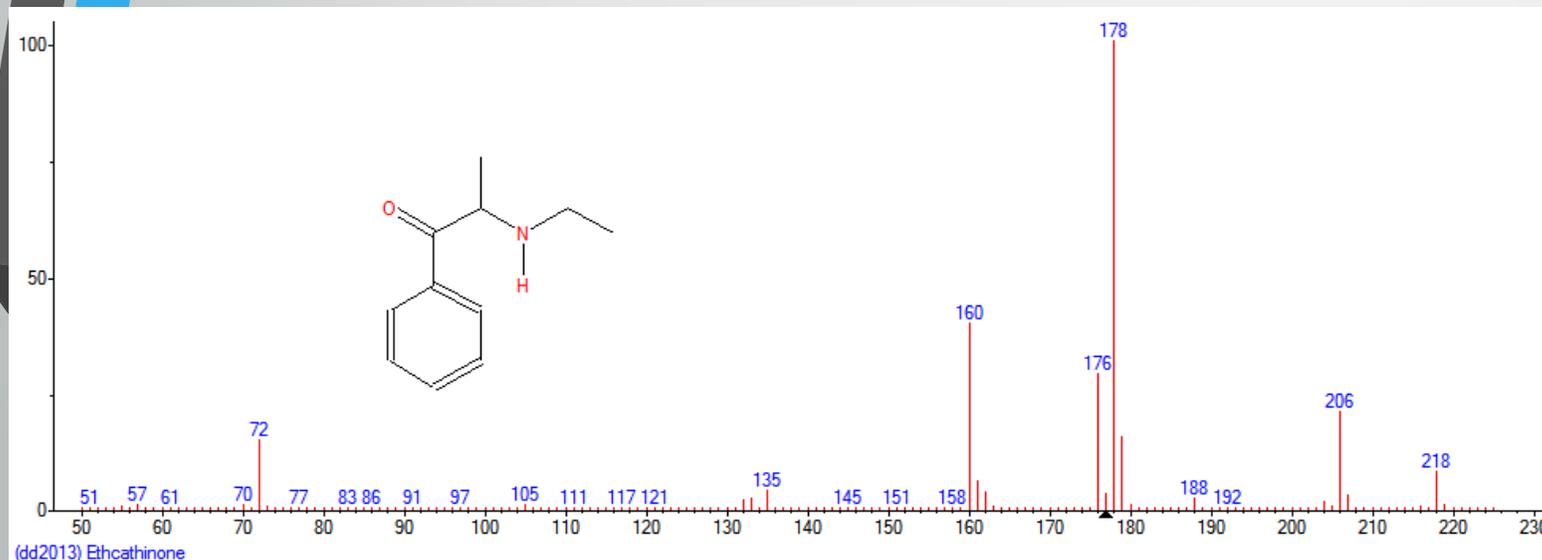
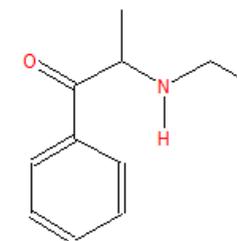
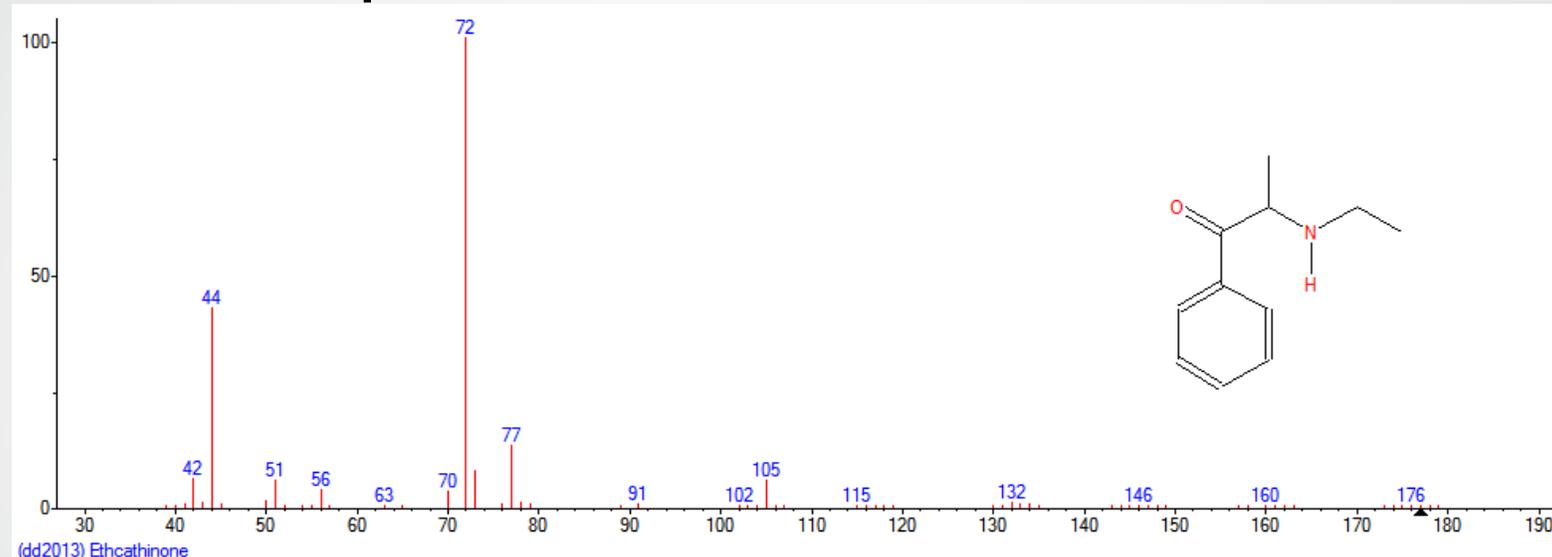
Synonyms:

1.2-Ethylaminopropiophenone

2.Ethylpropion

3.N-Ethylcathinone

4.RI: 1372 (DB-1)



Name: Ethcathinone

Formula: C₁₁H₁₅NO

MW: 177 Exact Mass: 177.115364 CAS#: 51553-17-4 ID#: 16014 DB: dd2013

Other DBs: None

Comment: DigiLab GmbH (C) 2013

10 largest peaks:

178 999 | 160 396 | 176 289 | 206 210 | 179 156 |
72 149 | 218 81 | 161 62 | 135 43 | 162 37 |

Synonyms:

1.2-Ethylaminopropiophenone

2.Ethylpropion

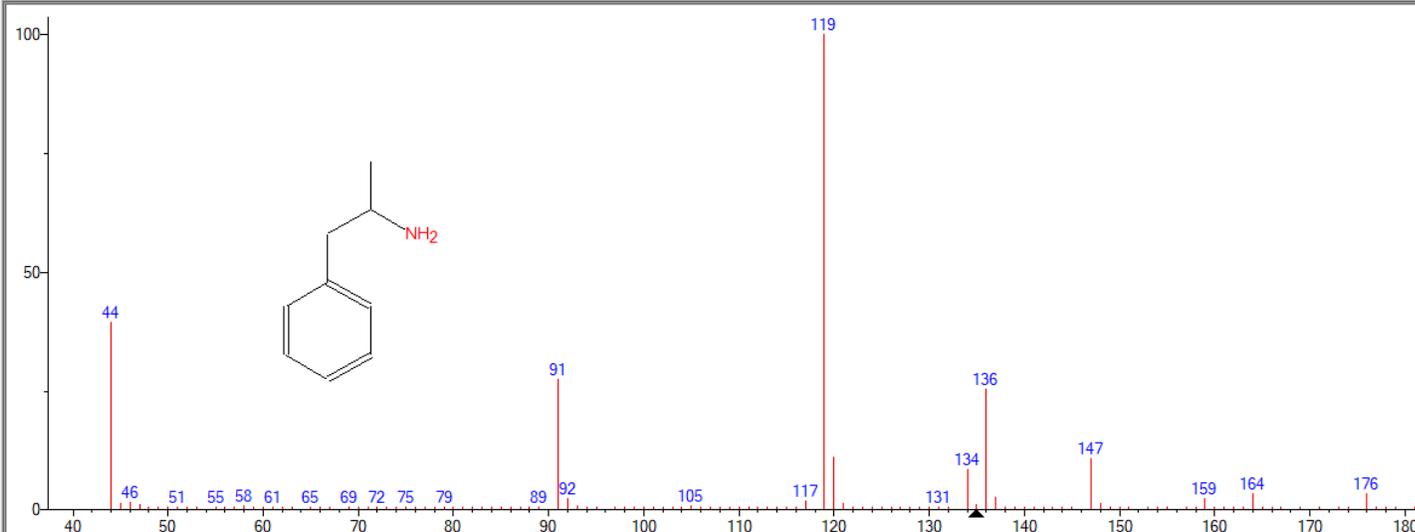
3.N-Ethylcathinone

4.RI: 1372 (DB-1)

Библиотека DesDrugs2013, масс-спектр Amfetamine

Amfepramone
Amfetamin
Amfetamin
Amfetamin
Amfetamin
Amfetamin-D5
Amfetamine
Amfetamine
Amfetamine
Amfetamine
Amfetamine-D5
Amfetamine-M (4-OH) 2AC
Amfetaminil
Amfetaminil
Amfetaminil
Amfetaminil AC Isomer II
Amfetaminil AC Isomer I
Amfetaminilo
Amfetaminilo
Amfetaminilo
Amidoprocain
Amidoprocain
Amidopyrine
Amidopyrine
Amidopyrine
Amifenazol
Amilorid
Amilorida
Amiloride
Amiloridum
Amine,N,N,N-tris(2-trifluoroacetoxyethyl)-
Aminitrozol
Aminitrozolom
Aminitrozolum
Aminoantipyrine AC
Aminoantipyrine AC
Aminocarb
Aminoethanol
Aminoethylpiperazine
Aminoparaoxon
Aminoparaoxon
Aminophenazone
Aminophenazone
Aminophenazone
Aminopielik 50SL
Aminopromazin
Aminopromazina
Aminopromazine
Aminopromazinum
Aminopurine 2TMS

Names Structures /



(dd2013) Amphetamine

Name: Amphetamine

Formula: C₉H₁₃N

MW: 135 Exact Mass: 135.104799 CAS#: 300-62-9 ID#: 180 DB: dd2013

Other DBs: None

Comment: DigiLab GmbH (C) 2013

10 largest peaks:

119 999 | 44 392 | 91 273 | 136 253 | 120 109 |

147 106 | 134 83 | 164 33 | 176 33 | 137 24 |

Synonyms:

1. Amfetamin

2. Amfetamine

3. Desoxynorephedrin

4. Dextroamphetamine

5. (R,S)-1-Phenyl-2-propylamin

6. RI: 1123 (SE-30)

Estimated non-polar retention index (n-alkane scale):

Value: 1171 iu

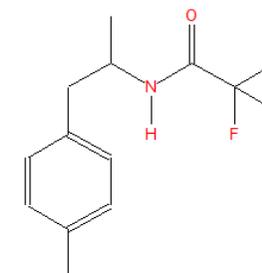
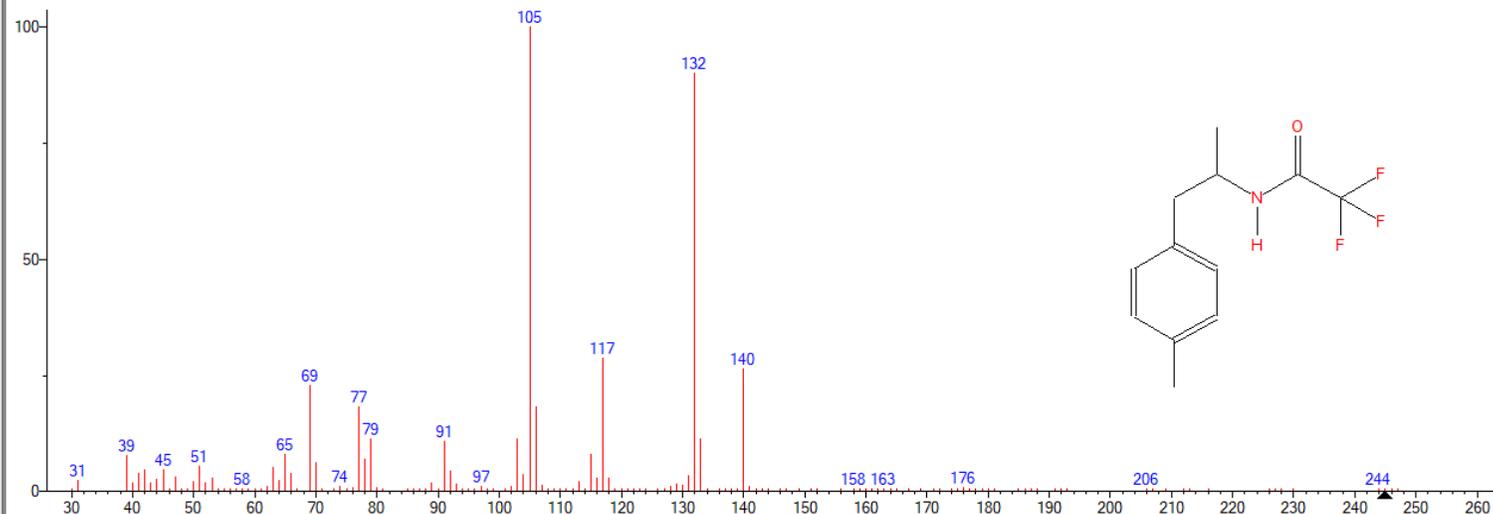
Confidence interval (Nitrogen-containing): 83(50%) 356(95%) iu

Retention index:

Plot/Text / Plot /

Библиотека DesDrugs2013, масс-спектр Amphetamine

- Amoxicillin 4 TMS
- Amphetamin**
- Amphetamine
- Amphetamine
- Amphetamine
- Amphetamine
- Amphetamine 2AC
- Amphetamine 2TFA
- Amphetamine 2TMS
- Amphetamine 2TMS
- Amphetamine 2TMS
- Amphetamine-3-methyl
- Amphetamine-A
- Amphetamine AC
- Amphetamine AC
- Amphetamine-A (CH2O)
- Amphetamine-A (CH2O)
- Amphetamine BUT
- Amphetamine CO2 2TMS
- Amphetamine CO2 TMS
- Amphetamine (CS2-Artifact-H2S)
- Amphetamine (CS2-Artifact-H2S)
- Amphetamine-D3 PFO
- Amphetamine-D5 TFA
- Amphetamine FORM.ET
- Amphetamine HCF
- Amphetamine.N,N-Bis-(2-Fluorobenzyl)-
- Amphetamine.N,N-Dibenzyl
- Amphetamine.N,N-Dibenzyl
- Amphetamine PFO
- Amphetamine PFP
- Amphetamine PROP
- Amphetamine TFA
- Amphetamine TFA
- Amphetamine TMS
- Amphetamine TMS
- Amphetaminil
- Amphetaminil
- Amphetaminil
- Amphetaminil
- Amprone
- Amrinone HFB
- Amrinone PFP
- Amrinone TFA
- AMT
- a-MT
- AMT
- a-MT
- AMT



(dd2013) 4-Methylamphetamine TFA

Name: 4-Methylamphetamine TFA

Formula: C₁₂H₁₄F₃NO

MW: 245 Exact Mass: 245.102749 ID#: 6235 DB: dd2013

Comment: Designer drug derivative. QI:985 VIM DigiLab GmbH (C) 2013

10 largest peaks:

105 999 | 132 898 | 117 286 | 140 263 | 69 227 |
77 180 | 106 180 | 103 111 | 133 111 | 79 110 |

Synonyms:

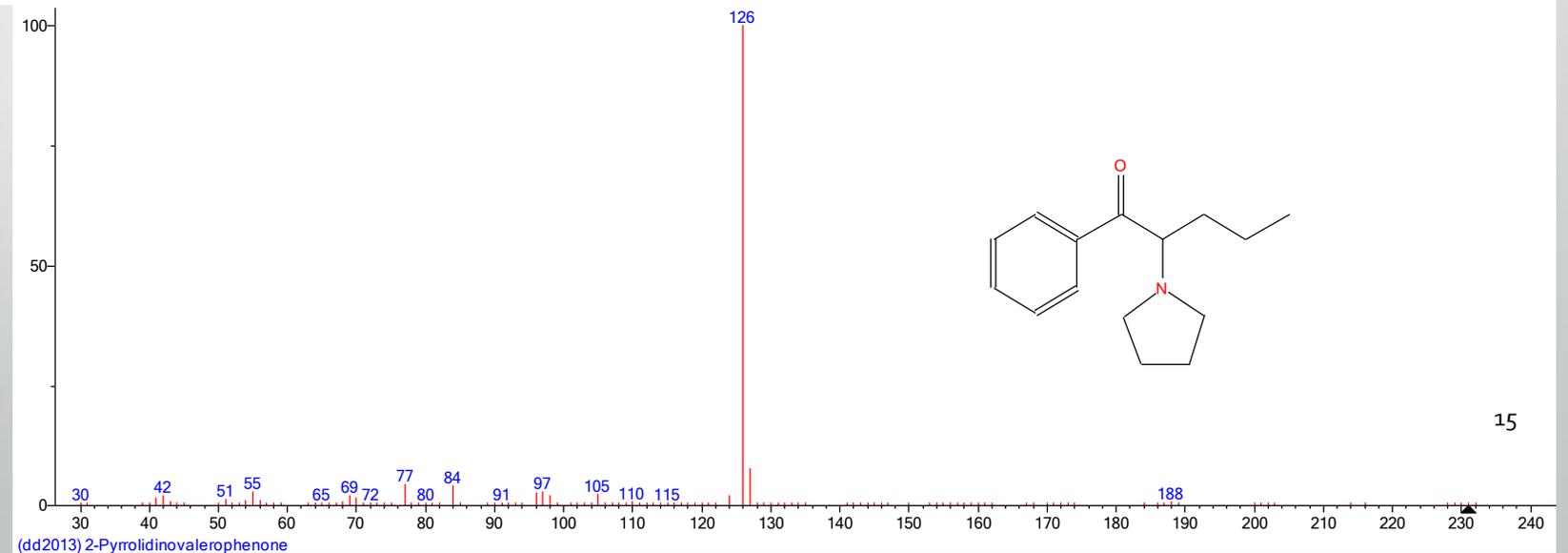
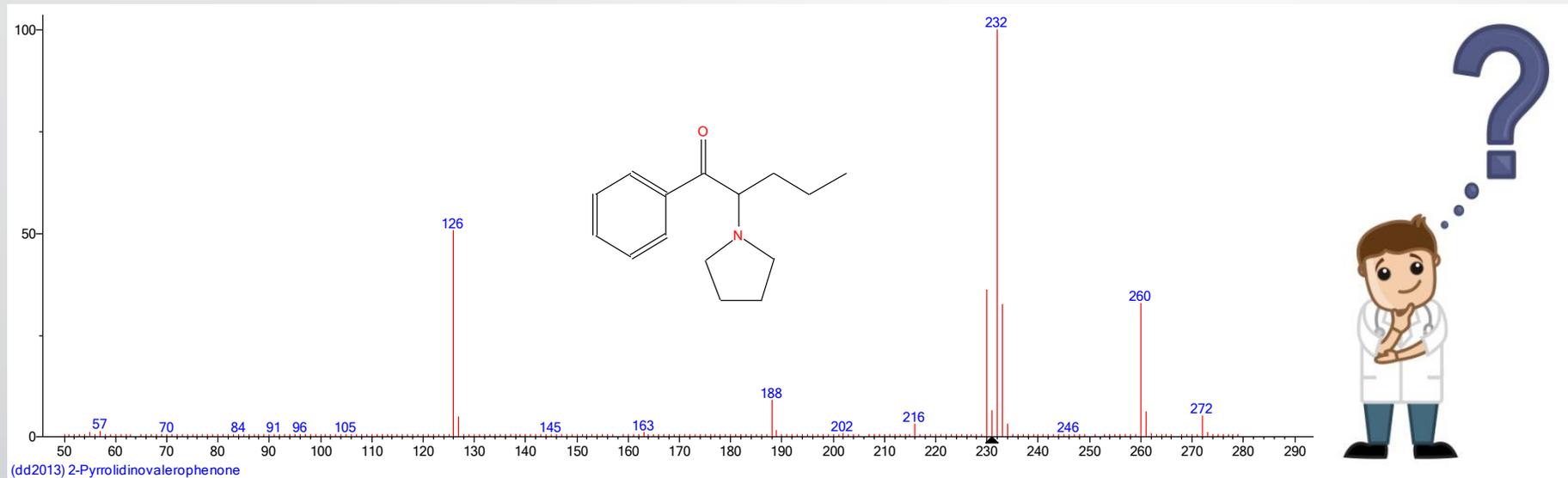
1. Amphetamin
2. RI: 1362 (SE-30)

Estimated non-polar retention index (n-alkane scale):

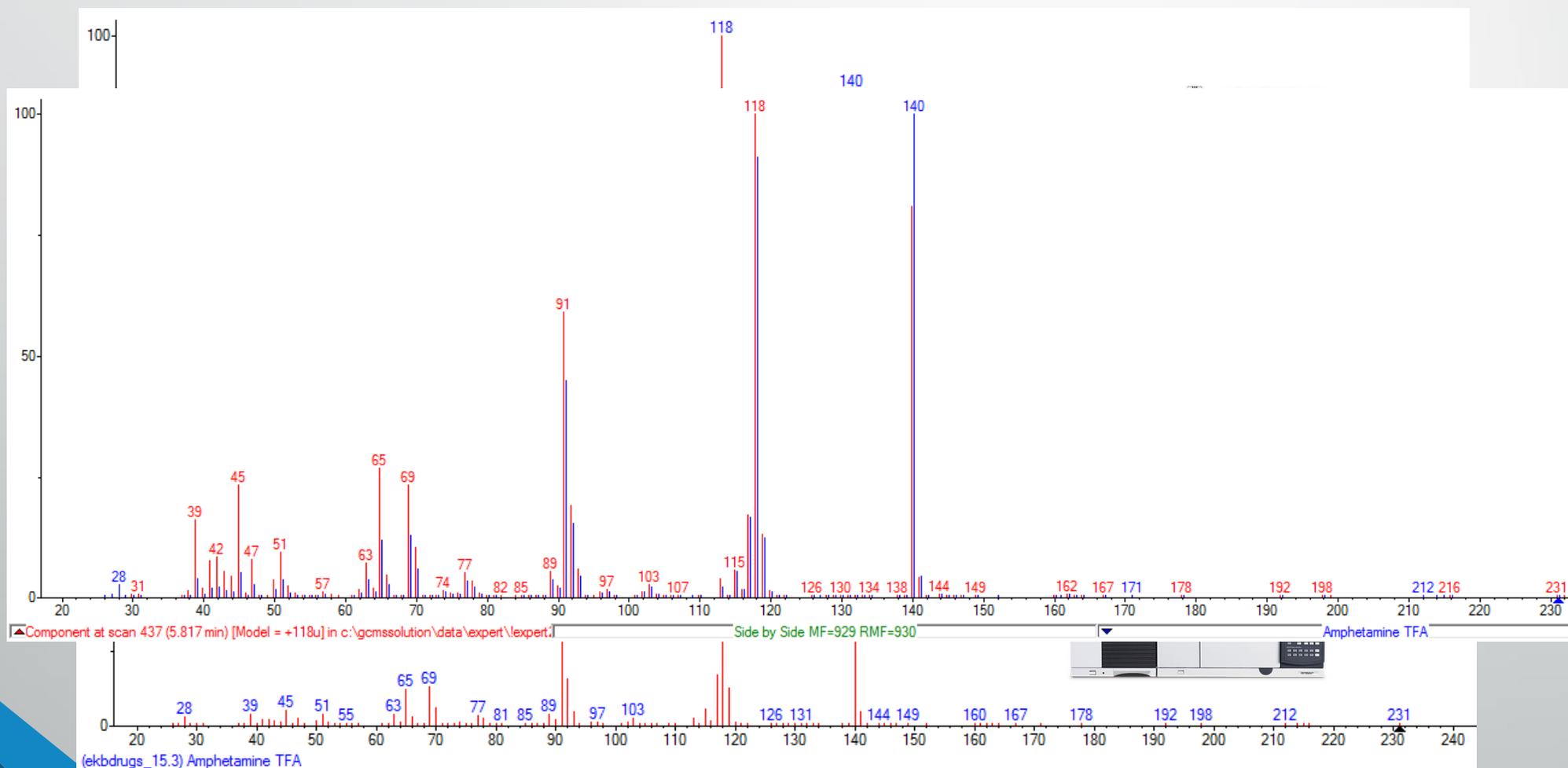
Value: 1475 iu

Confidence interval (Diverse functional groups): 89(50%) 382(95%) iu

Библиотека DesDrugs2013, масс-спектры α -пирролидиновалерофенона (α -PVP)



Особенности масс-спектров при разной настройке масс-спектрометров



Выводы:

- Идентификация соединений в рамках скрининга предполагает использование в рутинной практике ХТЛ автоматической деконволюции и нескольких баз данных.
- Базы данных, содержащие только масс-спектры нативных веществ, могут использоваться в ХТА
- Возможно использование региональных библиотек
- Корректность результата идентификации, предложенного программой библиотечного поиска определяет высококвалифицированный специалист!
- Стоимость ограничивает использование коммерческих библиотек и их регулярное обновление



Благодарю за внимание!