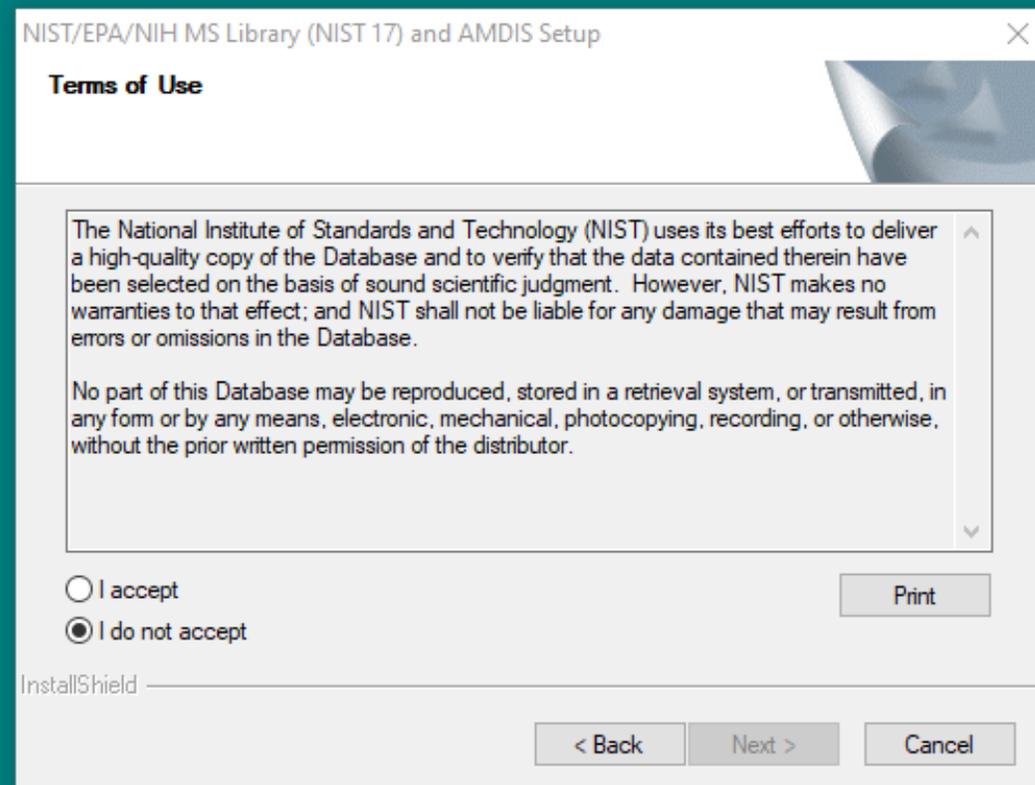
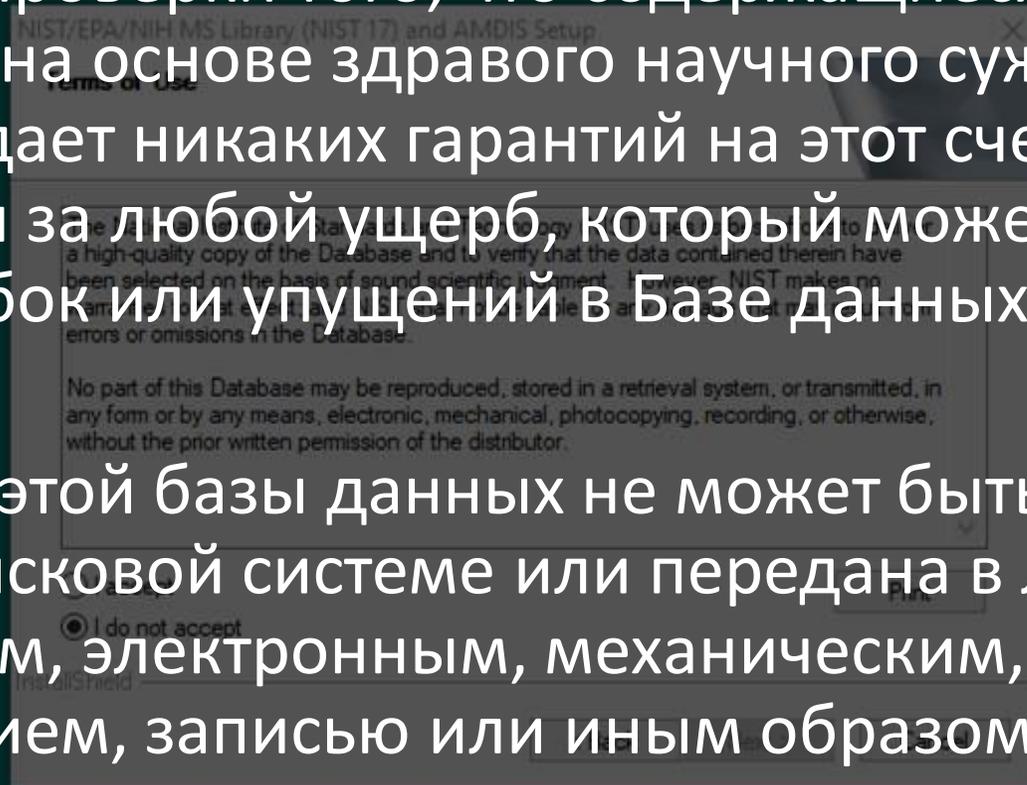


Использование библиотек масс-спектров в практике проведения подтверждающих ХИМИКО-ТОКСИКОЛОГИЧЕСКИХ исследований.

*Доклад подготовлен при непосредственном участии
Печникова А.Л., Смирнова А.В.*



- Национальный институт стандартов и технологий (NIST) делает все возможное для предоставления высококачественной копии базы данных и проверки того, что содержащиеся в ней данные были отобраны на основе здравого научного суждения. Тем не менее, NIST не дает никаких гарантий на этот счет; и NIST не несет ответственности за любой ущерб, который может возникнуть в результате ошибок или упущений в Базе данных.



- Никакая часть этой базы данных не может быть воспроизведена, сохранена в поисковой системе или передана в любой форме или любым способом, электронным, механическим, фотокопированием, записью или иным образом, без предварительного письменного разрешения дистрибьютора.

В подготовке данного материала приняли участие
78 лабораторий (67 ХТЛ и 11 СХО).

*Приносим благодарность всем принявшим участие в
подготовке данного доклада!*

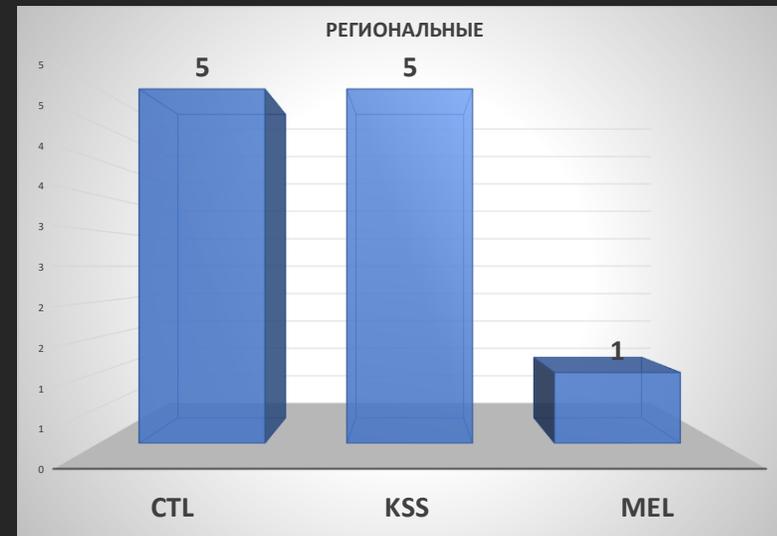
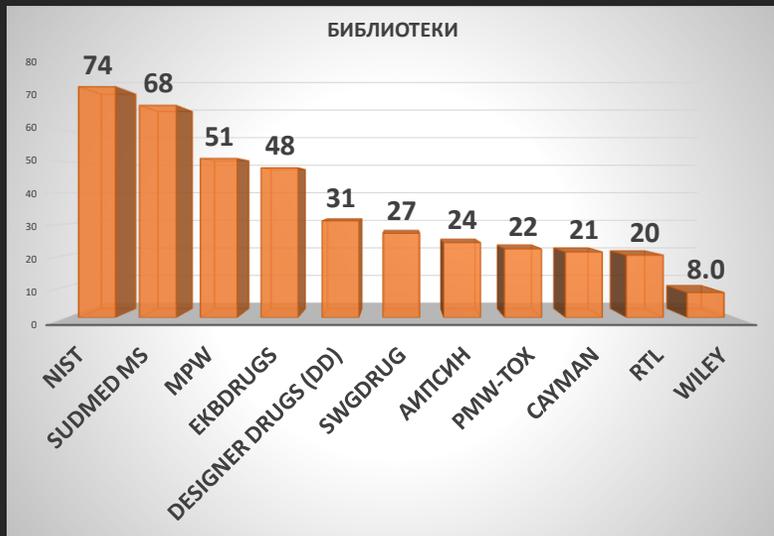
ВОПРОС 1: Каким из используемых Вами ПРОГРАММ отдаете наибольшее предпочтение в своей практике? И почему?

ВОПРОС 2: Какие из используемых Вами ПРОГРАММ не подходят для ХТИ и СХА?
И почему?

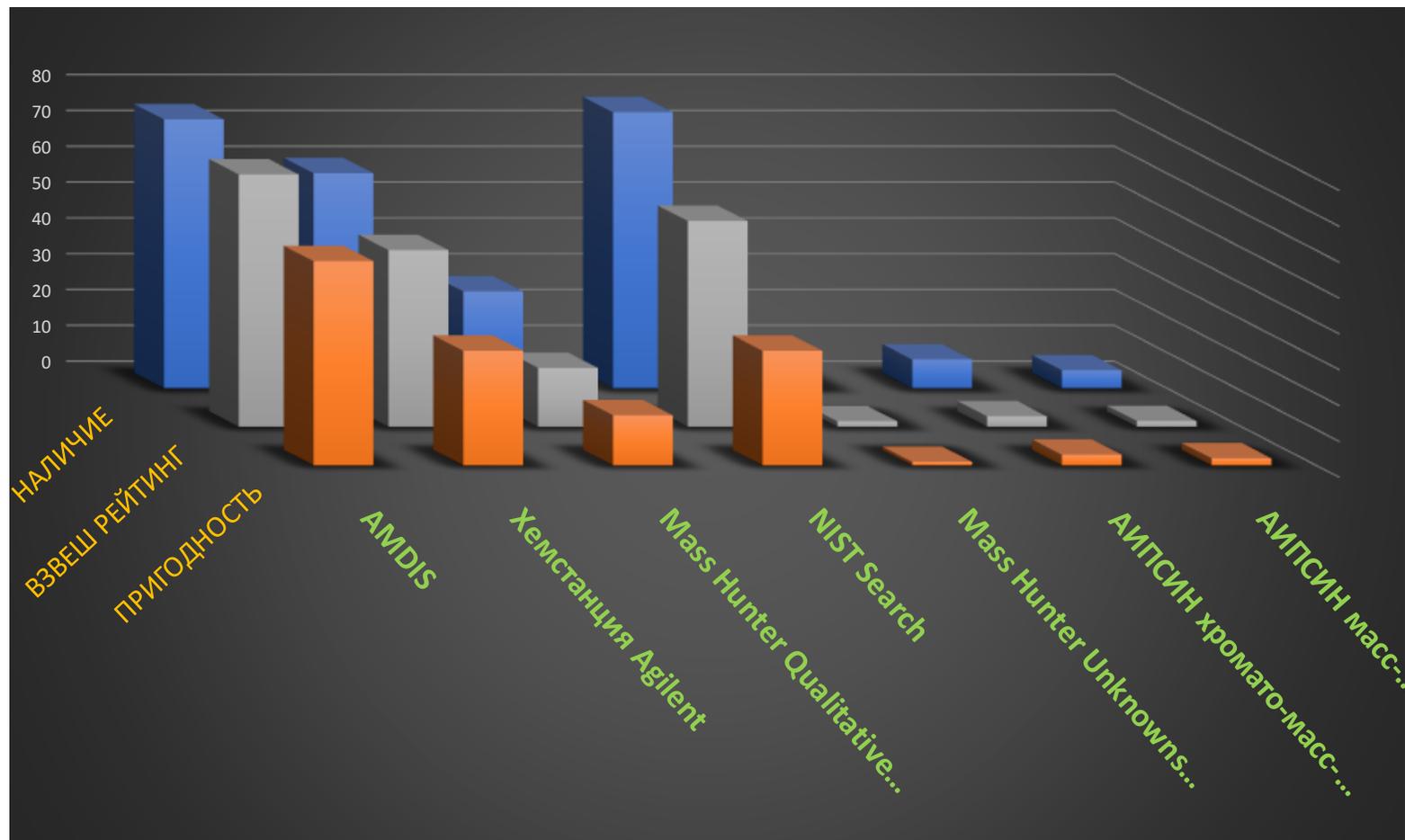
ВОПРОС 3: Каким из используемых Вами БИБЛИОТЕК масс-спектров отдаете наибольшее предпочтение в своей практике? И почему?

ВОПРОС 4: Какие из используемых Вами БИБЛИОТЕК масс-спектров не подходят для ХТИ и СХА? И почему?

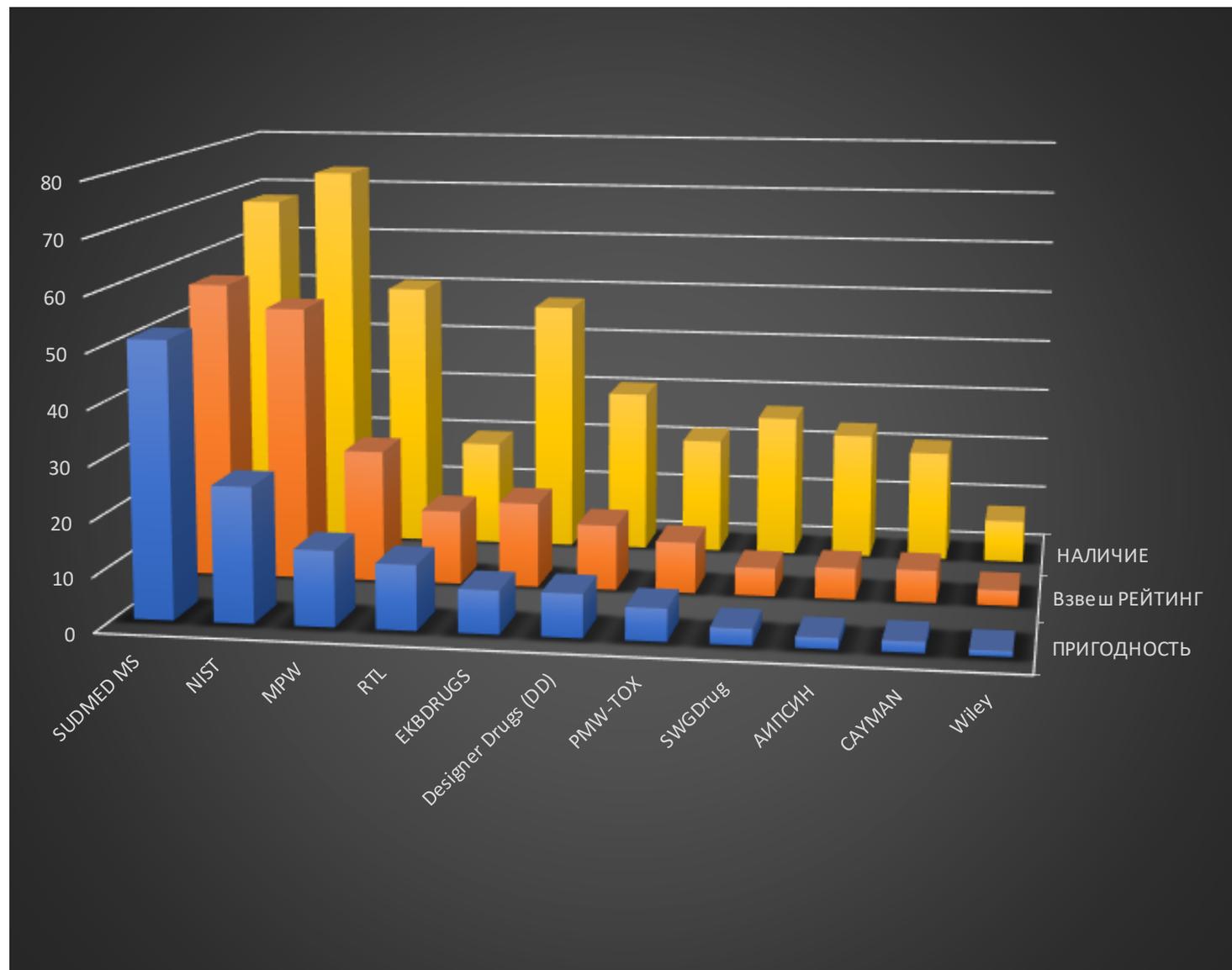
ВОПРОС 5: Бывали ли ошибки по вине ПРОГРАММ или БИБЛИОТЕК?
Опишите суть ошибок и наименование программ или библиотек.



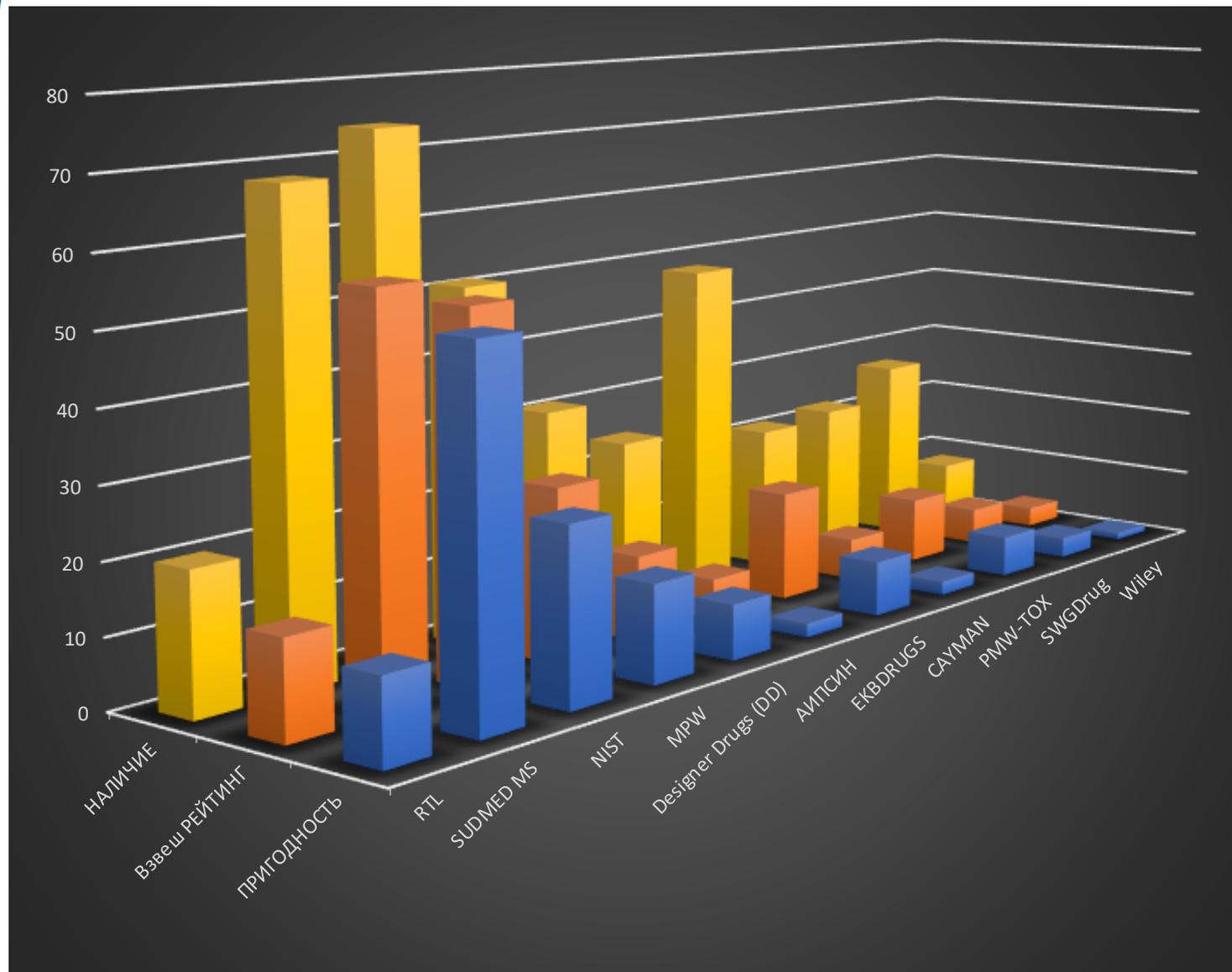
ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ
ПРИМЕНЕНИЯ ПРОГРАММ



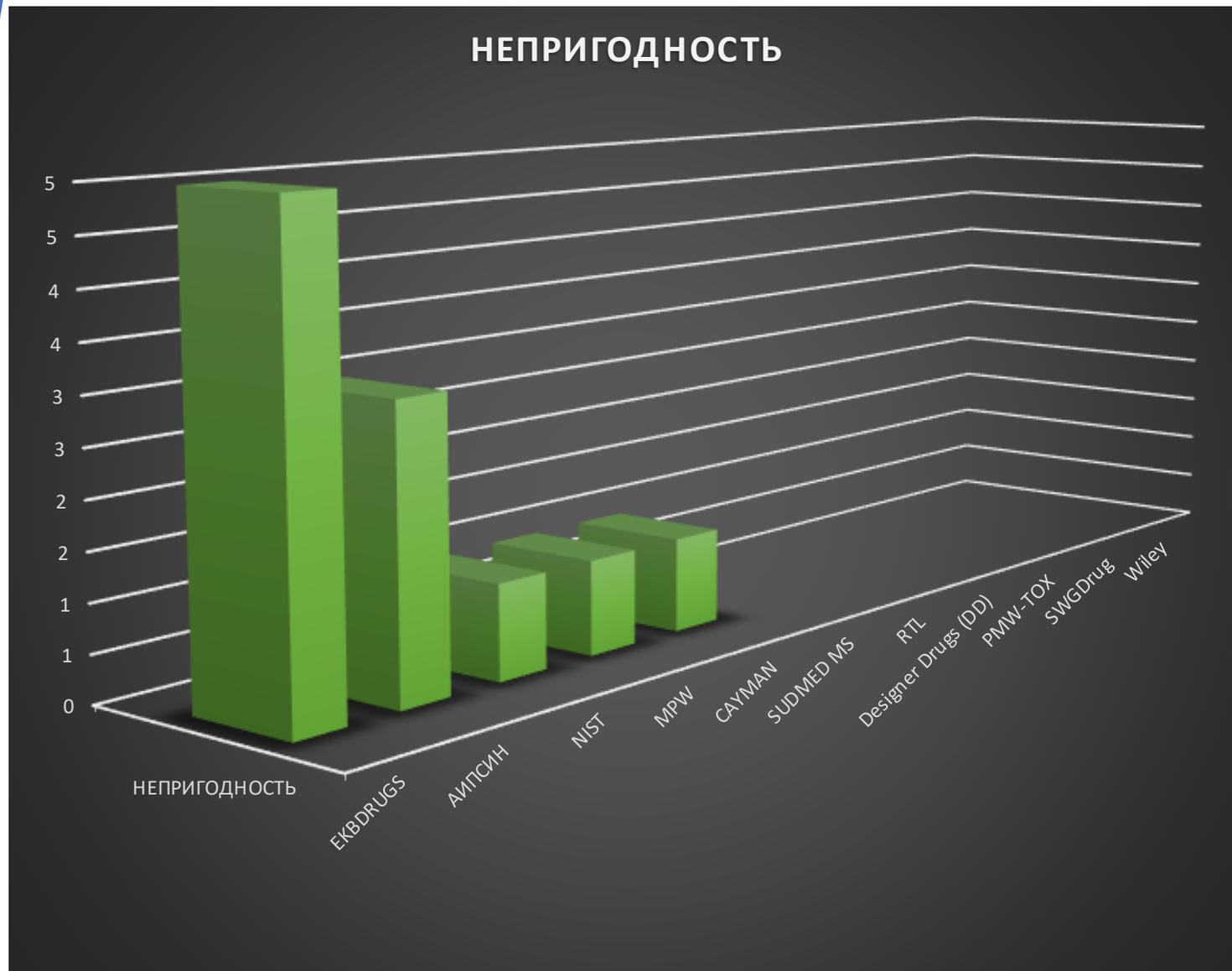
РЕЙТИНГ И НАЛИЧИЕ БИБЛИОТЕК

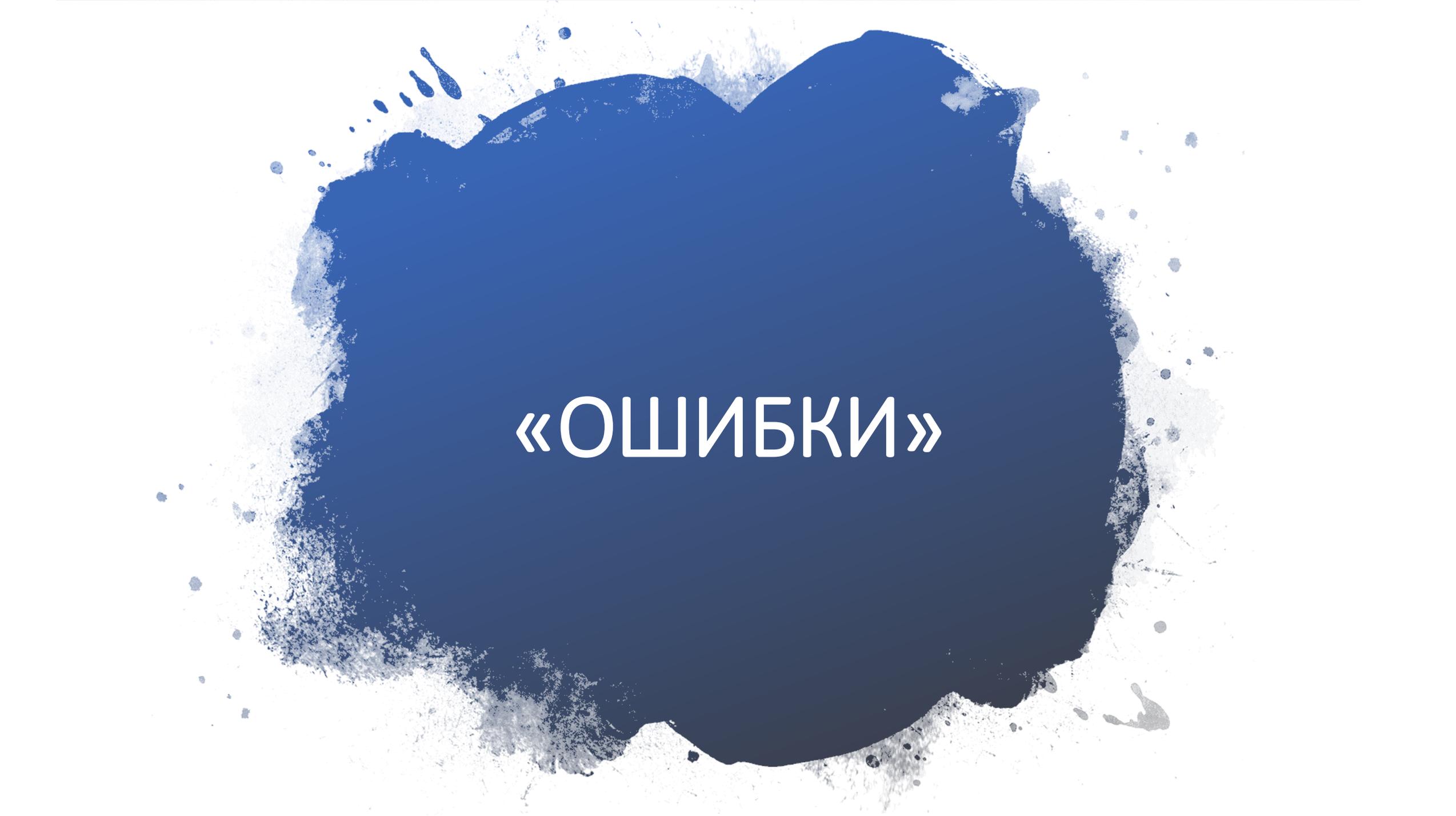


ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ
ПРИМЕНЕНИЯ
БИБЛИОТЕК



НЕПРИГОДНОСТЬ БИБЛИОТЕК ДЛЯ ХТА и СХА



A dark, irregular ink blot with white splatters on a white background. The blot is roughly circular but has jagged, organic edges. The center is a solid dark blue/black, while the edges are lighter and more textured, with many small white dots and streaks scattered around it, suggesting a splatter or ink bleed effect.

«ОШИБКИ»

«ОШИБКИ» ПРОГРАММ И БИБЛИОТЕК. МНЕНИЯ НАЧИНАЮЩИХ СПЕЦИАЛИСТОВ:

- NIST- бывают случаи ставит в приоритет вещество с наименьшим совпадением по ионам ,что в свою очередь вводит в заблуждение
- Чаще всего встречаются ошибки, когда программа идентифицирует как одно вещество, а по библиотечному поиску это совершенно иное вещество. Так же, различные библиотеки по разному идентифицируют одно и то же вещество.
- Бывают, так как библиотека ищет сходство с определенным веществом, а его может не быть в данной программе или библиотеке
- Ошибок по вине программ не было. В библиотеке RTL отсутствуют многие вещества и метаболиты. Также искажается результат, при высоких концентрациях веществ, а также при следовых количествах...

«ОШИБКИ» ПРОГРАММ И БИБЛИОТЕК. МНЕНИЯ ОПЫТНЫХ СПЕЦИАЛИСТОВ:

- Спектры Benzadrone или 2C-E, например, некоторые неопытные юзеры могут спутать без уточнения RT(RI)...
- Ошибки не из-за библиотек, а из-за неверной интерпретации результатов экспертом...
- По вине программ или библиотек – не было ошибок. Оператор должен быть достаточно квалифицированным, умеющим корректно применять на практике имеющиеся программные продукты и оценивать результаты, в том числе используя данные из публикаций и справочной литературы...
- Неточности в библиотеках не приводят к неверной интерпретации масс-спектров, поскольку каждый «сомнительный» спектр в «ручном» режиме просматривается высококвалифицированным специалистом и анализируется с использованием нескольких библиотек, литературных данных, а также с учетом особенностей фрагментации молекул органических соединений...

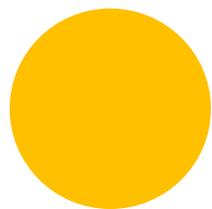
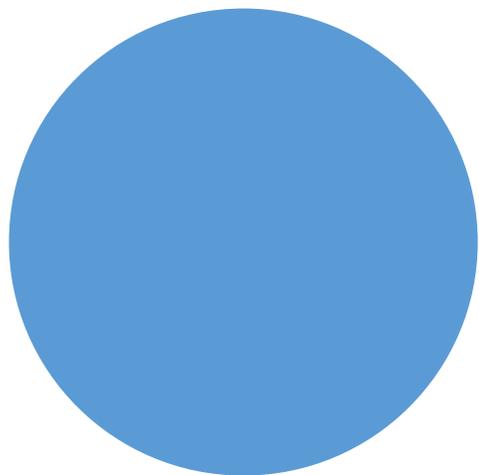
НАШИ ВЫВОДЫ:

ВЫВОДЫ:

1. Самой востребованной системой библиотечного поиска является АМДИС;
2. Деконволюция называется необходимым условием успешной обработки хроматограмм биологических объектов;
3. Необходимым условием успешного решения задач называется комплексное применение специализированных и общих библиотек, различных поисковых систем и критическая, комплексная оценка специалистом всех полученных результатов и исходных данных в совокупности;
4. Самыми востребованными и применимыми для СХА и ХТА являются на данном этапе библиотеки: SUDMED-MS, NIST, MPW, RTL, EKBDRUGS, DESIGNER DRUGS;
5. Усредненная последовательность применения этих библиотек: 1:RTL/ SUDMED-MS, 2:NIST, 3:MPW, 4:DESIGNER DRUGS, 5:EKBDRUGS;

ВЫВОДЫ-2:

6. Значимых ошибок и неточностей в библиотеках, оказывающих влияние на результаты идентификации при правильном применении – не выявлено (кроме известных ошибок в RTL и NIST);
7. Однако имеется тенденция к применению только высокорейтинговых специализированных или регионально-ориентированных библиотечных сборок, а в некоторых лабораториях – только устаревших классических библиотек, в том числе без деконволюции, что чревато появлением систематической ошибки в виде ложноотрицательных результатов;
8. Не обновляются классические библиотеки: в среднем используются версии NIST – 2014 год, Designer Drugs – 2014 и MPW – 2011 год, т.е. отставание на 5-8-10 лет;
9. Недостаточно распространена и недостаточно используется библиотека Designer Drugs, которая содержит ценные актуальные спектры НПС и их метаболитов и дериватов, которые отсутствуют в NIST и MPW



НАШИ ПРЕДЛОЖЕНИЯ:



ПРЕДЛОЖИТЬ СЛЕДУЮЩИЕ ПРОГРАММЫ ДЛЯ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ:

1. **AMDIS** - Automated Mass spectral Deconvolution and Identification System. Автоматизированная система масс-спектральной деконволюции хроматограмм и идентификации выделенных масс-спектров. AMDIS предоставляется как часть полного пакета базы данных MS NIST, так и демонстрационной базы данных NIST. Кроме того, AMDIS можно загрузить как отдельную программу.
2. **NIST MS Search Program** – Система поиска по масс-спектрам. Предоставляется как часть полного пакета базы данных MS NIST, так и демонстрационной базы данных NIST.

ПРЕДЛОЖИТЬ :

- При проведении нецелевых скрининговых исследований для исключения и идентификации широкого круга веществ, рекомендуется последовательное или параллельное применение нескольких библиотек самых последних версий (выпусков), содержащих наиболее актуальную информацию о спектрах новых психоактивных веществ (NPS), их метаболитов и дериватов.
- При проведении целевого анализа возможно использование отдельных специализированных библиотек более старых версий (выпусков), только при условии наличия в них спектров и характеристик целевых определяемых веществ.

ПРЕДЛОЖИТЬ СЛЕДУЮЩИЕ БИБЛИОТЕКИ МАСС-СПЕКТРОВ ЭЛЕКТРОННОЙ ИОНИЗАЦИИ :

1. ***NIST*** – коммерческая библиотека общего назначения Национального института стандартов США (NIST). Версия 2017 года (NIST 17) содержит четыре масс-спектральных библиотеки и библиотеки индексов удерживания (RI)/GC. Есть две библиотеки EI: mainlib (267376 спектров) и replib (39246 спектров).

Обновление – раз в 3 года.

Страна происхождения: **США**

2. ***The Mass Spectral Library of Drugs, Poisons, Pesticides, Pollutants and their Metabolites, 5th Edition (MPW5e)*** - коммерческая масс-спектральная библиотека лекарств, ядов, пестицидов, загрязнителей и их метаболитов, 5-е издание, 2017 год. Содержит 10430 масс-спектров и индексов удерживания ГХ, а также 7800 их метаболитов.

Обновление – раз в 3 года.

Страна происхождения: **ФРГ**

ПРЕДЛОЖИТЬ СЛЕДУЮЩИЕ БИБЛИОТЕКИ МАСС-СПЕКТРОВ ЭЛЕКТРОННОЙ ИОНИЗАЦИИ - 2:

3. ***Designer Drugs (DD2018)*** — коммерческая масс-спектральная библиотека «дизайнерских наркотиков», фармацевтических препаратов, боевых отравляющих веществ, и связанных с ними веществ. Включает 26459 масс-спектров 20381 химического соединения с подробной информацией и химической структурой для каждой записи.

Обновление – 1 раз в год.

Страна происхождения: **ФРГ**

4. ***EKBDRUGS (MS LIBRARY EKBDRUGS)*** – коммерческая специализированная экспертная электронная библиотека масс-спектров, предназначенная для идентификации наркотических средств и психотропных веществ методами ГХМС.

База данных обновляется по мере сбора и накопления новых данных.

Страна происхождения: **РФ**

ПРЕДЛОЖИТЬ СЛЕДУЮЩИЕ БИБЛИОТЕКИ МАСС-СПЕКТРОВ ЭЛЕКТРОННОЙ ИОНИЗАЦИИ - 3:

5. ***RF-Des_Drug*** — некоммерческая база данных масс-спектров новых дизайнерских наркотиков. Данные масс спектры получены из разных источников как в России, Белоруссии, Украины, Германии, США, Израиля и других стран. на все новые вещества мы стараемся получить ЯМР спектры, для подтверждения их структуры, это нелегкая работа, но мы делаем это.

Обновление – по мере сбора и накопления новых данных.

База свободна для скачивания и использования.

Страна происхождения: **РФ**

ПРЕДЛОЖИТЬ СЛЕДУЮЩИЕ БИБЛИОТЕКИ МАСС-СПЕКТРОВ ЭЛЕКТРОННОЙ ИОНИЗАЦИИ - 4:

6. ***SUDMED MASS SPECTRA (SUDMED MS)*** – некоммерческая специализированная экспертная библиотека масс-спектров (ЭИ), предназначенная в первую очередь для предварительной и подтверждающей идентификации новых синтетических психоактивных веществ и их метаболитов (синтетических каннабимиметиков, дизайнерских наркотиков) методами ГХМС в биологических жидкостях и тканях в виде различных дериватов.

Библиотека пополняется и верифицируется профессиональным экспертным сообществом по мере сбора и накопления новых спектров.

Распространяется свободно через сайт sudmed-ms.ru

Страна происхождения: **РФ**

ПРЕДЛОЖИТЬ СЛЕДУЮЩИЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ СЕРВИСЫ:

WEB-Сервисы «AIP SIN WEB» - предназначена для информационного обеспечения деятельности в сфере контроля за оборотом наркотических веществ и прекурсоров. Позволяет решать задачи о статусе государственного контроля обнаруженных соединений и отнесении их к производным. Содержащаяся информация охватывает почти весь доступный на сегодняшний день объем экспертных знаний по наркотическим и психотропным веществам.

Сервисы регулярно пополняются и обновляются не менее 6 раз в год.

Доступ – через сайт aip sin.com после регистрации

Страна происхождения: **Республика Беларусь**

ПРЕДЛОЖИТЬ РЕГУЛЯРНЫЕ ОБНОВЛЕНИЯ:

Регулярно, централизованно закупать обновления, не реже 1 раза в 3 года или по мере выпуска обновленных версий, следующих ключевых библиотек масс-спектров зарубежного происхождения:

1. ***NIST*** - Страна происхождения: **США**
2. ***The Mass Spectral Library of Drugs, Poisons, Pesticides, Pollutants and their Metabolites (MPW)*** - Страна происхождения: **ФРГ**
3. ***Designer Drugs (DD2018)*** - Страна происхождения: **ФРГ**

ПРЕДЛОЖИТЬ УГЛУБЛЕННОЕ ОБУЧЕНИЕ:

Включить в программы повышения квалификации модули по изучению основ масс-спектрометрии, включая:

- Изучение приемов интерпретации масс-спектров с учетом особенностей фрагментации молекул органических соединений НСПВ и НПВ;
- Изучение приемов библиотечного поиска, включая автоматизированную и ручную деконволюцию спектров;
- Изучение основных программ библиотечного и автоматизированного поиска: **NIST MS Search, AMDIS, Mass Hunter Unknowns Analysis;**
- Изучение основных библиотек масс-спектров: **NIST, MPW, Designer Drugs, SWGDRUGS, CAYMAN, EKBDRUGS, RF-DesDrug, SUDMED-MS, RTL и т.п.**