



Association
of chemical
toxicological and
forensic chemical
analysis specialists



НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
Российские библиотеки масс-спектров
токсикологически значимых веществ.
Алгоритмы пополнения, верификации и статуса

10-11 февраля 2022
Москва





Ассоциация специалистов по
химико-токсикологическому
и судебно-химическому
анализу



КОНФЕРЕНЦИЯ

РОССИЙСКИЕ БИБЛИОТЕКИ МАСС-СПЕКТРОВ
ТОКСИКОЛОГИЧЕСКИ ЗНАЧИМЫХ ВЕЩЕСТВ.
АЛГОРИТМЫ ПОПОЛНЕНИЯ, ВЕРИФИКАЦИИ И СТАТУСА.

ОРГАНИЗАТОРЫ:

- Ассоциация специалистов по химико-токсикологическому и судебно-химическому анализу
- Бюро судебно-медицинской экспертизы Департамента здравоохранения города Москвы
- Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН (ИФХЭ РАН)

НА КОНФЕРЕНЦИИ БУДУТ ОБСУЖДЕНЫ СЛЕДУЮЩИЕ ВОПРОСЫ:

- выявление и установление структуры новых психоактивных веществ, их метаболитов и совершенствование правовой базы по пресечению их оборота;
- опыт разработки и использования пользовательских библиотек масс-спектров, созданных российскими специалистами в период 1998-2022 гг;
- опыт использования непрерывно пополняемой единой пользовательской библиотеки масс-спектров;
- методы и методологические подходы к верификации библиотек масс-спектров;
- статус пользовательских библиотек масс-спектров;
- совместная работа лабораторий по выявлению новых веществ, пополнению и верификации библиотек м асс-спектров.

10-11 ФЕВРАЛЯ
2022

МЕСТО ПРОВЕДЕНИЯ
КОНФЕРЕНЦИИ:
БЮРО СМЭ ДЗ МОСКВЫ,
ТАРНЫЙ ПРОЕЗД, Д.3.

Программа конференции

Время	Докладчик	Должность, место работы	Название доклада
11:00	Приветственное слово		
<p>Шигеев Сергей Владимирович, начальник Бюро СМЭ ДЗ Москвы, профессор, доктор медицинских наук</p> <p>Буряк Алексей Константинович, чл.-корр. РАН, директор Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН (ИФХЭ РАН)</p>			
11:30-12:00	Унижаев Владимир Николаевич	ГУНК МВД России	Актуальность создания легитимных Российских библиотек масс-спектров психоактивных веществ. По результатам ГАК от 17.12.2021
12:00-12:40	Катаев Сергей Сергеевич	Интернет-портал ФСМ Форум судебных медиков России http://www.sudmed.ru Заведующий СХО Бюро СМЭ, Пермь	Проблемы идентификации в судебной химии
12:40-13:20	Савчук Сергей Александрович Григорьев Андрей Михайлович	д.х.н. Бюро СМЭ ДЗМ, ИФХЭ РАН, АСХТАиСХА д.х.н., АСХТАиСХА	Российские пользовательские библиотеки для криминалистики и токсикологии. Возможные методологические подходы к их верификации для получения официального статуса. Кросс-верификация хроматографических и спектральных данных, полученных разными методами.
13:20-14:00	Григорьев Андрей Михайлович	д.х.н., АСХТАиСХА	Проблема пополнения библиотек. Установление структуры новых психоактивных веществ, выявленных в биологических объектах
14:00-14:40	Шевырин Вадим Анатольевич	к.х.н., Уральский федеральный университет	Возможности библиотеки масс-спектров и хроматографических индексов удерживания EKBDRUGS для идентификации наркотических средств и психотропных веществ

14:40-15:20	Печников Александр Леонидович (ждем решения об участии)	Интернет-портал Sudmed MS	SUDMED MASS SPECTRA (SUDMED MS) – некоммерческая объединённая Российская ГХ-МС библиотека масс-спектров (ЭИ)
15:20-16:00	Григорьев Андрей Михайлович	д.х.н., АСХТАиСХА	Российская ГХ-МС библиотека масс-спектров каннабимиметиков и их метаболитов Cann_Metab Отечественные библиотеки Cann_Metab масс-спектров для ВЭЖХ-МС/МС состояние проблемы и пути решения
16:00-16:40	Савчук Сергей Александрович	д.х.н. Бюро СМЭ ДЗМ, ИФХЭ РАН, АСХТАиСХА	PB_GC50 экспертная библиотека масс-спектров ГХ-МС с фиксированными временами удерживания. Опыт внедрения в ХТЛ и СХО с 1999 г. по настоящее время. Библиотека масс-спектров PB_LC202 и метод для ВЭЖХ-МС/МС анализа, опыт внедрения

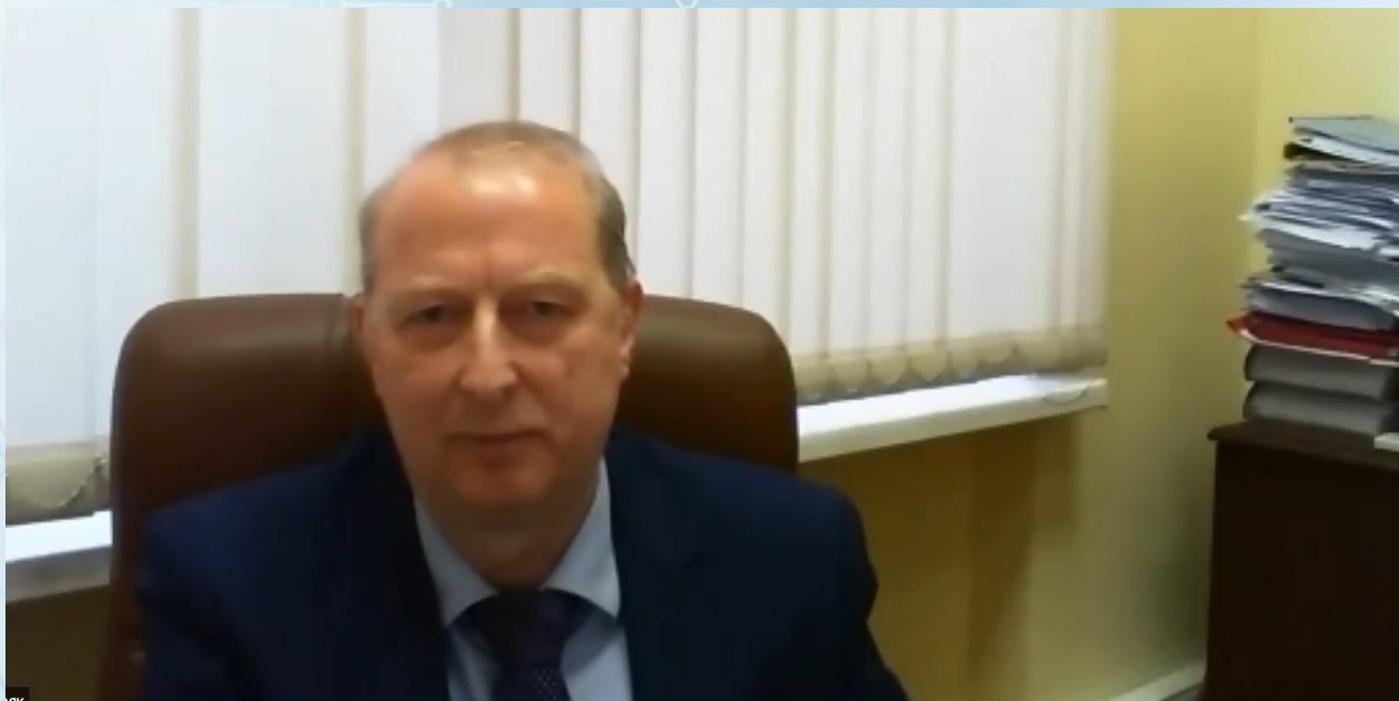
Второй день конференции 11 февраля 2022

11:00-11:40	Шаборшин Николай Юрьевич, Савчук Сергей Александрович	Ассоциация АСХТАиСХА	Многоцентровые сличительные испытания МежТокслаб , внешний аудит и профессиональное тестирование лабораторий как подход к валидации методов и верификации библиотек масс-спектров
11:40-12:00	Смирнов Алексей Витальевич	и.о. заведующего Референс-центра по мониторингу потребления ПАВ ГБУЗ «МНПЦ наркологии ДЗМ г. Москвы», к.ф.н	Мониторинг потребления психоактивных веществ в по результатам ХТА. Новые нормативные документы.
12:00-12:40	Кузнецов Даниил Витальевич	Заведующий ХТЛ Волгоградского ПНД	Мониторинг появления новых психоактивных веществ с использованием интернет ресурсов

12:40-13:00	Васильев Андрей	разработчик библиотеки масс-спектров для криминалистики rf-des_drug	Упреждающая идентификация структуры нового токсичного каннабимиметика – причины массовых смертельных отравлений в России в 2014 г.
13:00-13:40	Темердашев Азамат Зауалиевич	д.х.н., кафедра аналитической химии ФГБОУ ВО КубГУ, Краснодар	Возможности масс-спектрометрии высокого разрешения для создания и верификации библиотек масс-спектров
13:40-14:00	Лабутин Андрей	СХО Бюро СМЭ Томск	Тема уточняется
14:00-14:40	Мелentyев Алексей Борисович	к.х.н., Заведующий СХО Бюро СМЭ Челябинск	О проблеме отечественных библиотек масс-спектров
14:40-15:00	Юрченко Руслан Александрович	ЗАО «БелХард Групп», департамент экспертных систем (АИПСИН), г. Минск	Новые библиотеки масс-спектров психоактивных веществ
15:00-15:40	Кадочников Олег Петрович Савчук Сергей Александрович	Центр судебно-медицинской экспертизы МЗ Республики Молдова, Кишинев д.х.н. Бюро СМЭ ДЗМ, ИФХЭ РАН, АСХТАиСХА	Верификация библиотек масс-спектров с помощью сертифицированных стандартных образцов наркотических и лекарственных веществ
15:00-15:40	Ризванова Лилия Нажиповна	Заведующая ХТЛ БУ ХМАО-Югры «Нижневартовская психоневрологическая больница»	Опыт специалистов региональных лабораторий в выявлении новых психоактивных веществ и участие в пополнении библиотек масс-спектров

15:40-16:00	Айгумов Магомед Шапиевич	Заведующий ХТЛ ГБУЗ «ПНД г. Ноябрьск» ЯНАО	Пополнение методов и создание объединённой библиотеки масс- спектров и MRM (ВЭЖХ-МС/МС Shimadzu 8050) и их валидация с использованием контрольных проб PT-31,32,33, 38.
	Юдина Анастасия Петровна	СХО бюро СМЭ Пенза	

**Обсуждение докладов, выработка решения конференции и предложений ГУНК МВД России для
легитимации библиотек масс-спектров, созданных российскими специалистами
Создание рабочей группы**



**Алексей Константинович Буряк, чл.-корр. РАН, директор
Института химии и электрохимии им.А.Н.Фрумкина РАН (ИФХЭ РАН)**

Дорогие коллеги!

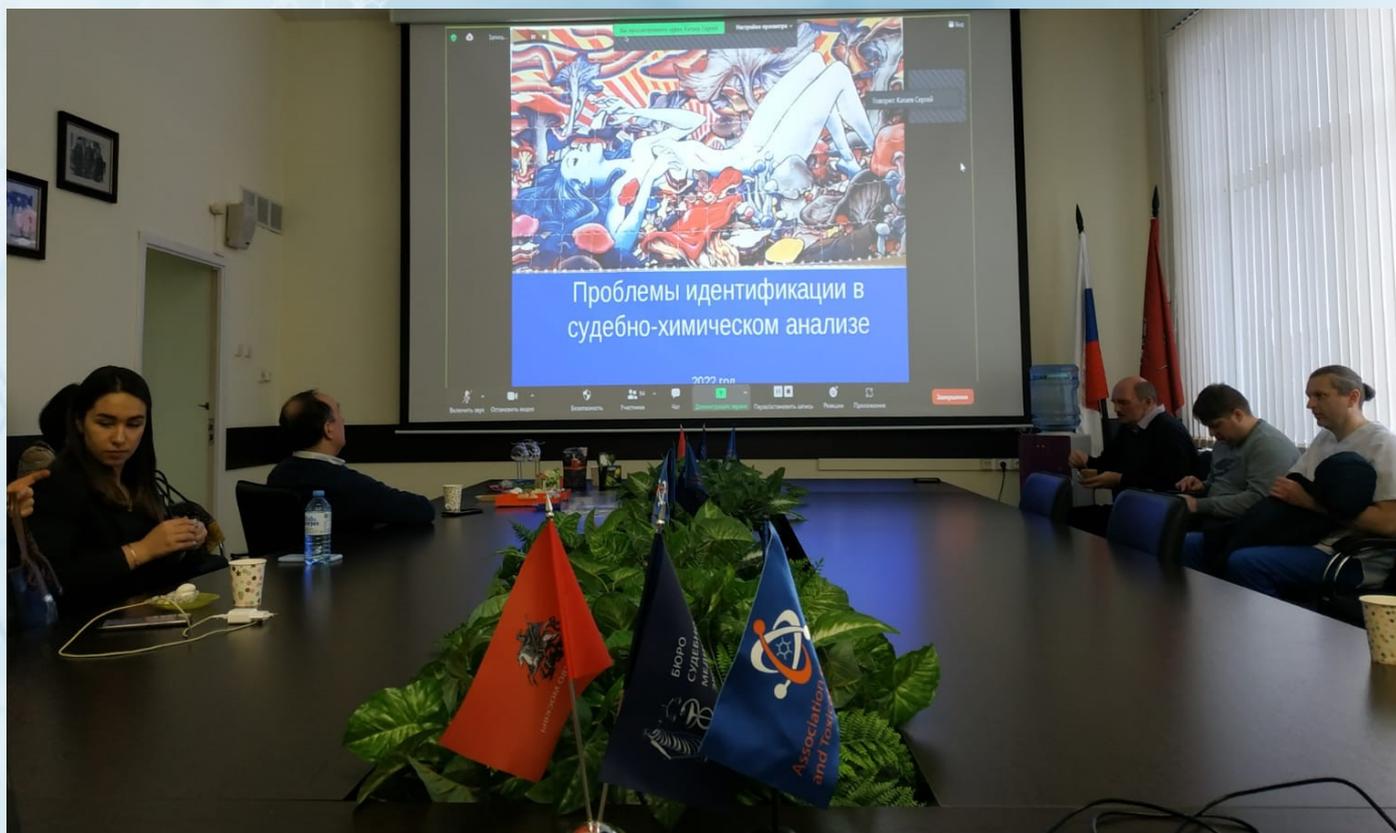
Я очень рад приветствовать такую представительную конференцию по актуальной проблеме! Эта проблема является частью общей фундаментальной задачи, такой как идентификация неизвестных соединений с помощью хромато-масс-спектрометрического метода. Ей занимаются много лет, накоплен уже большой опыт. Специфика тех объектов, с которыми вы работаете, требует, чтобы мы подошли гораздо более серьезно, чем к просто поиску так называемых неизвестных соединений при решении классической аналитической задачи. Поэтому здесь, конечно, помимо хромато-масс-спектрометрии в варианте с газовой хроматографией, наверняка должны быть задействованы не только библиотеки ионизации электронами, или химической ионизации. Надо использовать и двумерные библиотеки, и когда мы получаем спектры МС/МС, в ряде случаев, для загрязненных проб, это может быть очень важным критерием обнаружения и идентификации вещества.

Очень хорошо, что поднят вопрос о жидкостной хроматографии-масс-спектрометрии. У этого метода огромное будущее, в том числе и для приборостроителей нашей страны. Если сейчас мы создадим библиотеки к зарубежным приборам, которые будут основываться на каких-то усреднённых подходах, мы можем сформировать и требования к отечественному оборудованию.

Нельзя не сказать и о различных методах, которые мы используем для расчетов индексов удерживания. Это не только экспериментальные индексы, полученные опираясь на стандарты, сейчас мы умеем рассчитывать индексы и теоретически. Наверняка в наших библиотеках должны быть и расчётные, и экспериментальные спектры. Тогда у нас будет несколько критериев: данные ГХ-МС и данные ВЭЖХ-МС/МС, и рассчитанные спектры и в жидкостной, и в газовой хроматографии. Хотя, конечно, расчёт спектров это пока далёкое будущее. Пока мы пытаемся создать программы, которые позволяли бы правильно проводить библиотечную идентификацию.

Я желаю вам успехов в вашей работе!





Требования к библиотеке масс-спектров

- Качественные масс-спектры (полученные со стандартных образцов или соответствие, подтверждённое другими физико-химическими методами)
- Параметры удерживания (оптимально RI)
- Возможность интегрирования в различное ПО
- Быстрый и удобный параметрический поиск (по брутто-формуле, молекулярной массе, базовому иону)
- Интерактивная работа







Уральский
федеральный
университет

имени первого Президента
России Б.Н.Ельцина

Химико-
технологический
институт

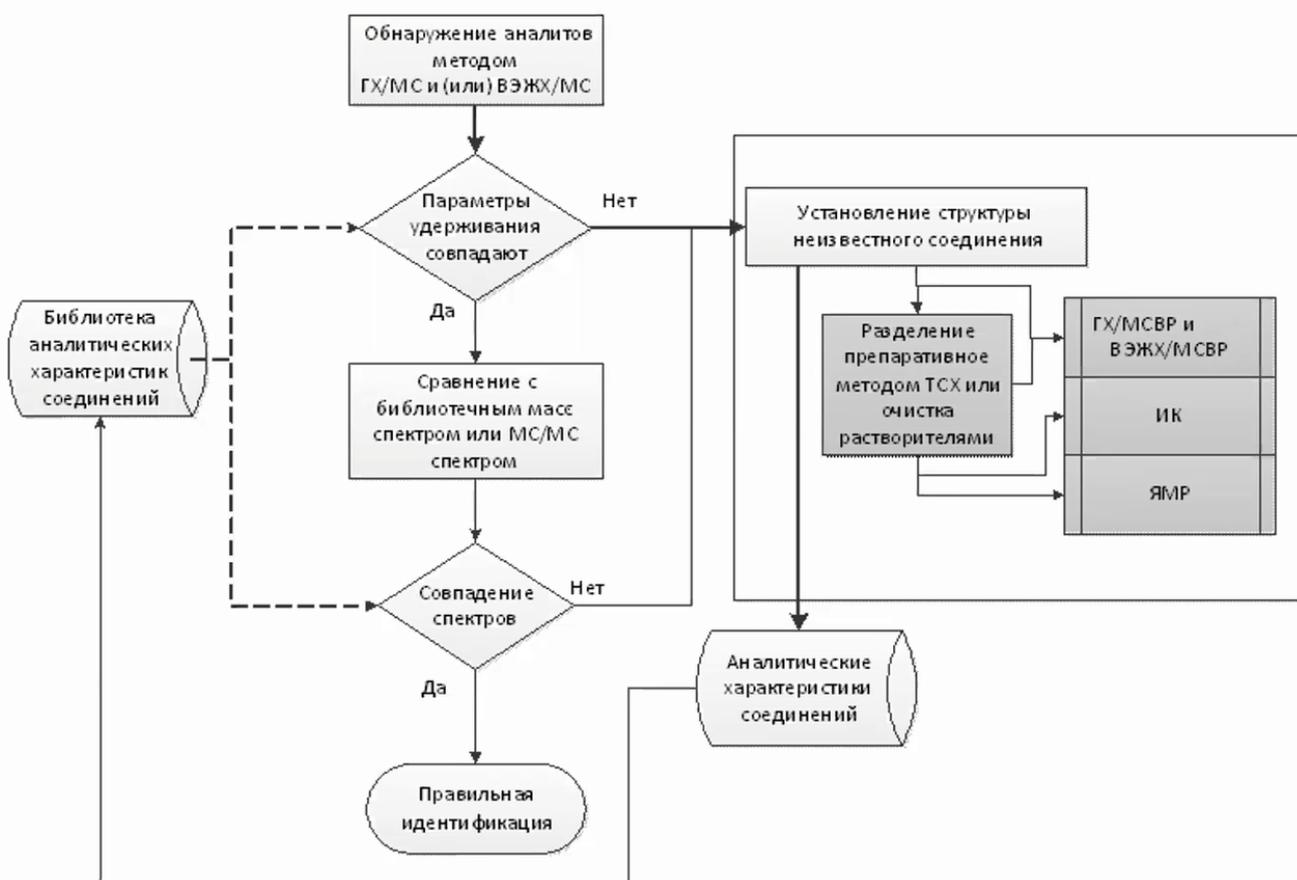
Возможности библиотеки масс-спектров и хроматографических индексов удерживания **EKBDRUGS** для идентификации наркотических средств и психотропных веществ



Шевырин Вадим Анатольевич

vadim.shevyrin@gmail.com

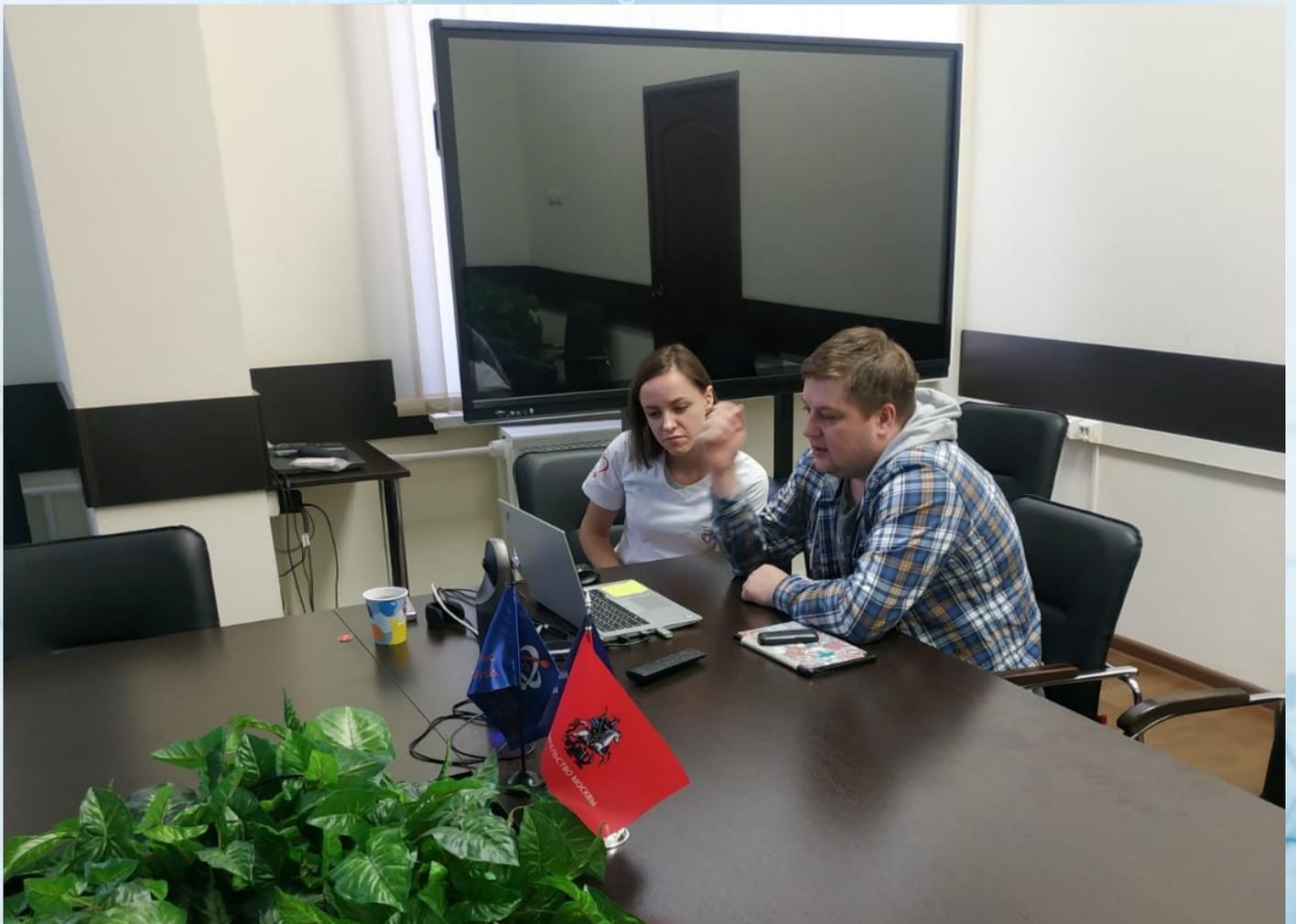
Алгоритм формирования библиотеки















РСТ
вн и м с

Стандартные справочные данные Масс-спектры наркотических, сильнодействующих веществ



Конференция «Российские библиотеки масс-спектров токсикологически значимых веществ. Алгоритмы пополнения, верификации и статуса»
10-11 февраля 2022 г.

Кулябина Елена Валериевна, к.т.н.
начальник лаборатории 009 – метрологического обеспечения
биологических и информационных технологий
ФГБУ «ВНИИМС»

kuliabina@vniims.ru

+7 (499) 781 44 13

+7 (916) 543 60 42

Кирилюк Александр Анатольевич, PhD

РСТ

1. Всероссийский научно-исследовательский институт метрологической службы – ВНИИМС



- Государственный метрологический институт Российской Федерации, подведомственная организация Федерального Агентства по техническому регулированию и метрологии (Росстандарта), Москва, ул. Озерная, 46.
- ВНИИМС выполняет функции:
 - **научно-методического центра** Росстандарта в части развития системы обеспечения единства измерений в Российской Федерации,
 - **научно-методического центра Государственной службы стандартных справочных данных о физических константах и свойствах веществ и материалов – ГСССД,**
 - научно-методического обеспечения **метрологической экспертизы государственных программ, НПА РФ,**
 - научно-методического обеспечения **метрологических служб** ФОИВ и государственных корпораций, метрологических служб юридических лиц и индивидуальных предпринимателей



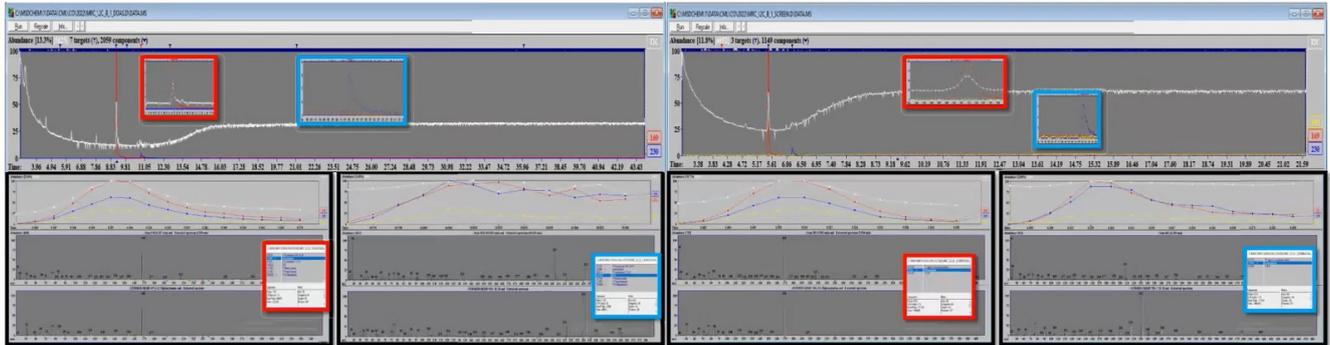
Алгоритм получения и применения данных ГСССД





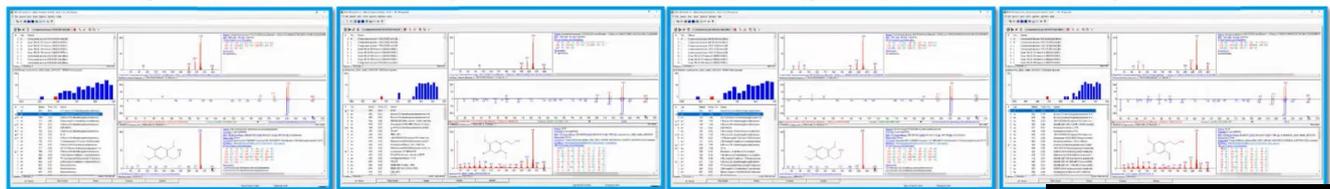


Аналит - 2С-В CAS#: 66142-81-2 (Работа в программе AMDIS)



Метод Doas. Общий вид хроматограммы и результаты автоматической обработки (красный пик - ДФА (0,6 мкг/мл); синий пик - аналит (концентрация 1 мкг/мл))

Метод Screen. Общий вид хроматограммы и результаты автоматической обработки (красный пик - ДФА (0,6 мкг/мл); синий пик - аналит (концентрация 1 мкг/мл))



1 / 22

Cadociniov Oleg

Сводная таблица результатов

Компонент (растворен в ацетонитриле)	Время выхода согласно библиотеке SUDMED, мин		Оригинальное время выхода, мин				Скорректированное время выхода, мин (эталон времени выхода ДФА для DOAS - 9,26 мин, времени выхода ДФА для SCREEN - 5,50 мин)				Отношение сигналов базовых пиков аналита и ДФА (AMDIS)		Отношение площадей пиков аналита и ДФА (AMDIS)		Отношение площадей базовых ионов аналита и ДФА (Chemstation)		
	Doas	Screen	AMDIS		Chemstation		AMDIS		Chemstation		Doas	Screen	Doas	Screen	Doas	Screen	
			Doas	Screen	Doas	Screen	Doas	Screen	Doas	Screen							
Diphenylamine (IS)			9,21	5,50	9,21	5,51											
2С-В (CAS#: 66142-81-2)			10,82	6,22	10,82	6,23	10,87	6,22	10,87	6,22	0,24	0,05	0,02	0,07	0,05	0,07	
Diphenylamine (IS)			9,21	5,51	9,21	5,51											
Carbamazepine CAS#: 298-46-4	14,656		14,55	8,14	14,56	8,14	14,60	8,12	14,61	8,13							
Diphenylamine (IS)			9,21	5,52	9,21	5,51											
Chlorpromazine (CAS#: 50-53-3)	16,06	8,921	15,82	8,83	15,83	8,83	15,87	8,81	15,88	8,82	10,27	0,06	1,21	0,05	0,25	0,21	
Diphenylamine (IS)			9,21	5,51	9,21	5,51											
(+)-(-)-Amphetamine (CAS#: 60-15-1)			4,59	na	4,59	3,34	4,64	#ЗНАЧ!	4,64	3,33	5,15		0,47		1,00	1,26	
Diphenylamine (IS)			9,21	5,51	9,21	5,51											
para-Methoxymethamphetamine			7,53	4,72	7,53	4,73	7,58	4,71	7,58	4,72	16,22	0,82	0,65	0,60	1,48	1,47	
Diphenylamine (IS)			9,21	5,51	9,21	5,51											
Trans-3-Methylfentanyl (CAS#: 42045-86-3)	18,213		17,90	9,90	17,91	9,91	17,95	9,89	17,95	9,90	9,93	0,64	1,46	1,44	1,27	0,95	
Diphenylamine (IS)			9,21	5,51	9,21	5,51											
Methamphetamine (CAS#: 7632-10-2)			5,10	3,53	5,10	3,55	5,15	3,52	5,15	3,54	18,17	0,27	0,79	0,41	1,72	1,71	
Diphenylamine (IS)			9,21	5,51	9,21	5,51											
Nordazepam (CAS#: 1088-11-5)			15,96	8,90	15,96	8,90	16,01	8,89	16,01	8,89	0,85		0,41		0,14	0,09	
Diphenylamine (IS)			9,20	5,51	9,21	5,51											
Dextromethorphan (CAS#: 125-71-3)	13,31		13,28	7,42	13,28	7,42	13,34	7,41	13,33	7,41	8,64	0,65	1,48	1,14	0,42	0,31	
Diphenylamine (IS)			9,21	5,52	9,21	5,51											
Fentanyl (CAS#: 437-38-7)			17,91	9,92	17,91	9,93	17,96	9,90	17,97	9,92	6,09		1,18		0,75	0,67	
Diphenylamine (IS)			9,21	5,52	9,21	5,51											
Gabapentin (CAS#: 60142-96-3)			8,86	5,40	8,85	5,37	8,91	5,38	8,90	5,36	0,47	0,04	0,08	0,04	0,10	0,14	
Diphenylamine (IS)			9,21	5,51	9,21	5,51											
Haloperidol (CAS#: 52-86-8)			21,32	11,78	21,33	11,78	21,37	11,77	21,38	11,78	0,53	0,05	0,10	0,11	0,14	0,12	

Двойной щелчок для переключения в полноэкранный режим, CTRL+щелчок для приведения размера экрана к



- РАЗВИТИЕ МЕДИЦИНСКИХ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ ПРИ ОКАЗАНИИ СПЕЦИАЛИЗИРОВАННОЙ МЕДИЦИНСКОЙ НАРКОЛОГИЧЕСКОЙ ПОМОЩИ: ПРАВОВЫЕ И ОРГАНИЗАЦИОННЫЕ АСПЕКТЫ
- СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДОСТОВЕРНОСТИ И ЭФФЕКТИВНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ УРОВНЯ КАРБОНИЛА ДЕФИЦИТНОГО ТРАНСФЕРРИНА (CDT) В СЫВОРОТКЕ КРОВИ ЧЕЛОВЕКА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ХРОМАТОГРАФА ЖИДКОСТНОГО И СИСТЕМЫ КАПИЛЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОФОРЕЗА
- ДИМENSIONАЛЬНЫЕ ГЕНЕТИЧЕСКИЕ МАРКЕРЫ РИСКА ИНТЕРНЕТ-ЗАВИСИМОГО ПОВЕДЕНИЯ У МОЛОДЫХ ВУЗРОВСКИХ
- ПРОБЛЕМАТИКА ВЛИЯНИЯ СРЕДЫ НАРКОЛОГИЧЕСКИХ ПАЦИЕНТОВ С ВЫСОКИМИ ПОВЕДЕНЧЕСКИМИ РИСКАМИ
- ОЦЕНКА РАСТРОЯТЛИВОСТИ НАРКОЛОГИЧЕСКИХ ЗАБОЛЕВАНИЙ У ПАЦИЕНТОВ С ТРЕВОЖНЫМИ РАСТРОЯСТВАМИ В САМАРЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВРЯМЫЕ И НЕВРЯМЫЕ МЕТОДОВ ОЦЕНКИ
- ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СОЦИАЛЬНЫХ СЕТЕЙ И КОМПЬЮТЕРНЫХ ИНТЕРНЕТ-ИТР В ПЕРИОД ПАНДЕМИИ COVID-19 СТУДЕНТАМИ В ВРОСЛАВСКОЙ ОБЛАСТИ

Импакт-фактор РИНЦ 2019
0,721



Сравнительный анализ достоверности и эффективности определения уровня карбонил-дефицитного трансферрина (CDT) в сыворотке крови человека с использованием хроматографа жидкостного и системы капиллярного электрофореза

Об авторах:

Клименко Татьяна Валентиновна

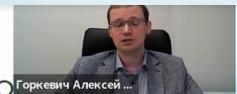
д-р мед. наук, профессор, и.о. директора ННЦ наркологии, филиала ФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр психиатрии и наркологии им. В.П.Сербского» Минздрава России; профессор кафедры уголовнопроцессуального права и криминалистики Всероссийского государственного университета юстиции (РПА Минюста России).

Аркус Максим Леонидович

канд. мед. наук, ст. науч. сотр. ННЦ наркологии, филиала ФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр психиатрии и наркологии им. В.П.Сербского» Минздрава России.

Ероценко Николай Николаевич

науч. сотр. ННЦ наркологии, филиала ФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр психиатрии и наркологии им. В.П.Сербского» Минздрава России



Комплектация



- Хроматограф «Близар CDT»
- Реагент CD1
- Методика поверки
- Компьютер с ПО «Флуорен»
- Шприц для ввода пробы
- Паспорт
- Промывочные растворы «Флуоренс А» и «Флуоренс Б»
- Бутыль для промывочных растворов
- Руководство по эксплуатации
- Адаптер питания





Проект решения конференции

«Российские библиотеки масс-спектров токсикологически значимых веществ. Алгоритмы пополнения, верификации и статуса»

1. Определить основные принципы формирования библиотек для скринингового обнаружения токсикологически значимых веществ на комплексной основе – совместным использованием методов газовой хроматографии-масс-спектрометрии (ГХ-МС) и высокоэффективной жидкостной хроматографии в сочетании с тандемной масс-спектрометрией высокого разрешения (ГХ-МС и ВЭЖХ-МСВР-МС2ВР).
 - 1.1. Общий набор библиотек должен иметь комплексный характер в плане использования разных методов анализа (ГХ-МС, ВЭЖХ/МС2 и ВЭЖХ-МС2ВР) и разного оборудования, применяемого в химико-аналитических лабораториях подразделений МЗ и МВД. Содержимое библиотек должно позволять делать непротиворечивые выводы о характере образца при совместном использовании ГХ-МС и ЖХ-МС.
 - 1.2. По назначению, принципу формирования библиотеки должны быть разделены на два сегмента.
 - 1.3. Первый сегмент – высоко достоверные библиотеки для экспертно-криминалистических лабораторий МВД, записи в которых подтверждены стандартными веществами или однозначными результатами структурного анализа с использованием следующих физико-химических методов: методами физической органической химии (ядерный магнитный резонанс, масс-спектрометрия высокого разрешения, включая регистрацию и исследование фрагментных спектров, рентгено-структурный анализ, инфракрасная спектрометрия, определение точной массы и др.). Библиотеки содержат информацию о неизменных веществах, полупродуктах и побочных продуктах их синтеза, также артефактах, образование которых связано с подготовкой проб и инструментальным анализом.
 - 1.4. Второй сегмент – библиотеки для химико-аналитических лабораторий МЗ. Они содержат все записи библиотек первого сегмента и дополнены информацией о веществах биогенного происхождения (метаболитах), достоверность которых подтверждается особым порядком. Библиотеки дополняют библиотеки первого сегмента и используются в комплексе с ними.
 - 1.5. Все библиотеки должны содержать информацию об удерживании веществ в указанных в аннотации к библиотеке подробно описанных хроматографических методах (абсолютные или относительные времена удерживания, фиксированные времена удерживания, индексы удерживания).
2. Провести ревизию существующих библиотек для ГХ-МС и ЖХ-МС.
 - 2.1. Выработать единые правила для оформления записей, характеризующих вещества.
 - 2.2. Оценить достоверность ХМС характеристик веществ, уже включенных в библиотеку, на основании их соответствия общепринятым международным библиотекам.
 - 2.3. Выработать показатели достоверности веществ в библиотеках второго сегмента.
 - 2.4. Проводить регулярный контроль методологии использования ГХ-МС и ЖХ-МС библиотек посредством тестовых испытаний аутентичных образцов мочи.
3. Разработать и утвердить ряд правил, регулирующих способы пополнения библиотек (включая оценку достоверности) и их публикаций.
 - 3.1. Предложить возможные источники ХМС характеристик новых соединений (метаболитов, артефактов, дериватов). В этом качестве могут выступать сведения, поступающие от ГУНК и иных государственных организаций, публикаций международных организаций и журналов, сегменты Интернета, сообщения территориальных лабораторий, научно-практические работы.
 - 3.2. Определить экспериментальные способы повышения достоверности записей в библиотеках второго сегмента (методы *in vivo* и *in vitro*, корреляция между данными ГХ-МС и ЖХ-МС, фиксирование соединений территориальными лабораториями и пр.).
 - 3.3. Важнейшим показателем достоверности ХМС характеристик новых соединений, включаемых в библиотеку второго сегмента, должно быть определение точных масс методами ГХ-МС или ЖХ-МС, а также фрагментные спектры высокого разрешения.
 - 3.4. Организовать рассылку обновленных библиотек территориальным лабораториям.
4. Обратиться с выработанными предложениями в госорганы, ответственные за разработку и легализацию библиотек.
5. Сформировать рабочую группу по созданию, верификации и пополнению отечественных библиотек масс-спектров токсикологически значимых веществ.

