SHIMADZU

РОЖДЕНИЕ НОВЫХ РЕШЕНИЙ:

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ СУДЕБНО-МЕДИЦИНСКОЙ ЭКСПЕРТИЗЫ С ПОМОЩЬЮ ТОКСИКОЛОГИЧЕСКОЙ БАЗЫ ДАНЫХ (Forensic Toxicological Database) НА ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРЕ GCMS-QP 2010 ULTRA/SE SHIMADZU

В современном мире употребление наркотиков и различных стимуляторов, отравление фармацевтическими препаратами и сельскохозяйственными химикатами превратилось в значительную социальную проблему. Перед судмедэкспертами стоит задача по выявлению и идентификации веществ, вызвавших токсикологическое отравление.

Для быстрого и эффективного решения этой задачи японская корпорация Shimadzu предлагает метод, основанный на использовании комплекса, состоящего из газового хроматографа – масс - спектрометра GCMS-QP2010Ultra (или GCMS-QP2010SE) и Судебно-Токсикологической базы данных, специально разработанной Shimadzu для расширенных исследований и судебно-медицинского освидетельствования.

Использование GCMS-QP2010Ultra/SE с Токсикологической Базой данных позволяет осуществить идентификацию компонентов исследуемой смеси в автоматическом режиме и произвести полуколичественный анализ некоторых веществ без использования стандартных образцов наркотических веществ, доступ к которым крайне ограничен законодательством, что создает трудности при оперативном контроле.

Данный метод обеспечивает скоростной анализ токсикологических веществ с высокой степенью достоверности полученных результатов.

А. Функциональные особенности Токсикологической базы данных SHIMADZU

- конфигурация базы данных:

База данных содержит библиотеку масс-спектров, состоящую из 1011 видов токсикологических соединений (включая TMS[1] - и TFA[2] - дериватизированные вещества), таких как наркотики, психотропные, седативные и другие лекарственные средства, а также сельскохозяйственные

[1] BSTFA (N,O-бис-триметилсилил-трифторацетамид).
[2] Трифторуксусная кислота.

Элемент генеральный дистрибьютор SHIMADZU

620075 г. **Екатеринбург**, ул. Бажова, 68, *т/ф* (343) 278-34-64, *e-mail:* element@usp.ru

634028 г. **Томск,** пр. Ленина, 1, оф. 404, *т/ф* (3822) 41-11-04, *e-mail:* tomsk@element.utk.ru

117105 г. **Москва**, Варшавское ш., 1, стр.6 БЦ “W Plaza 2”, *т/ф* (495) 514-00-48, *e-mail*: msc@element.utk.ru

630007 г. **Новосибирск**, ул. Октябрьская, 42, оф.225/3, *т/ф* (383) 20-20-726, *e-mail:* shim_ns@element.utk.ru

www.element-msc.ru

химикаты. Среди наркотиков дополнительно зарегистрировано в базе еще 208 соединений, которые были обнаружены в последние годы.

Категория I	Количество спектров	Категория II	Количество спектров
Наркотики	591	Free-body	208
		TMS-body	204
		TFA-body	179
Психотропные вещества	274	Free-body	156
		TMS-body	111
		TFA-body	7
Лекарства общего класса	110	Free-body	52
		TMS-body	58
Пестициды	36	Free-body	36

- серийный и полуколичественный анализ без использования стандартов:

Анализ проводится на хромато-масс-спектрометре GCMS-QP2010Ultra/SE в режиме Scan – так же как и при проведении типового судебно-медицинского анализа неизвестного образца для комплексного определения соединений. Метод Scan позволяет определять целевые компоненты без необходимости сужения диапазона масс. Кроме того, полученные масс-спектры могут быть использованы и для других целей. Продолжительность однократного анализа составляет не более 40 минут.

Токсикологическая база данных позволяет проводить полуколичественный анализ для некоторых запрещенных веществ используя метод внутреннего стандарта. Набор калибровочных функций уже содержится в файле метода анализа. В качестве внутреннего стандарта используется набор изотопномеченных веществ (дейтерированные соединения, в которых водород заменен на дейтерий). Внутренний стандарт поставляется в комплекте с Токсикологической базой данных.

В итоге, сочетание этой базы данных с хромато-масс-спектрометром Шимадзу GCMS-QP2010 Ultra, который отличается высокочувствительным сканированием, позволяет проводить как серийный анализ неизвестных образцов с идентификацией токсикологических веществ, так и их полуколичественный анализ без использования стандартов наркотических веществ.

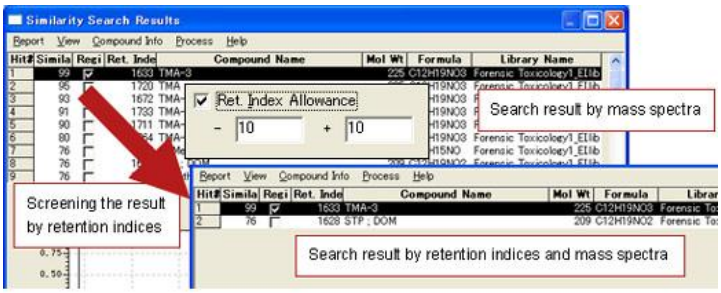
- простота подготовки к проведению анализу:

База данных стандартно уже содержит методы анализа на хромато-масс-спектрометре GCMS-QP2010 Ultra/SE. Подготовка к проведению анализа выполняется очень просто: необходимо только загрузить метод в систему. Метод содержит индексы удерживания, а идентификация компонентов производится по точно рассчитанному времени удерживания.

- высокая степень достоверности идентификации:

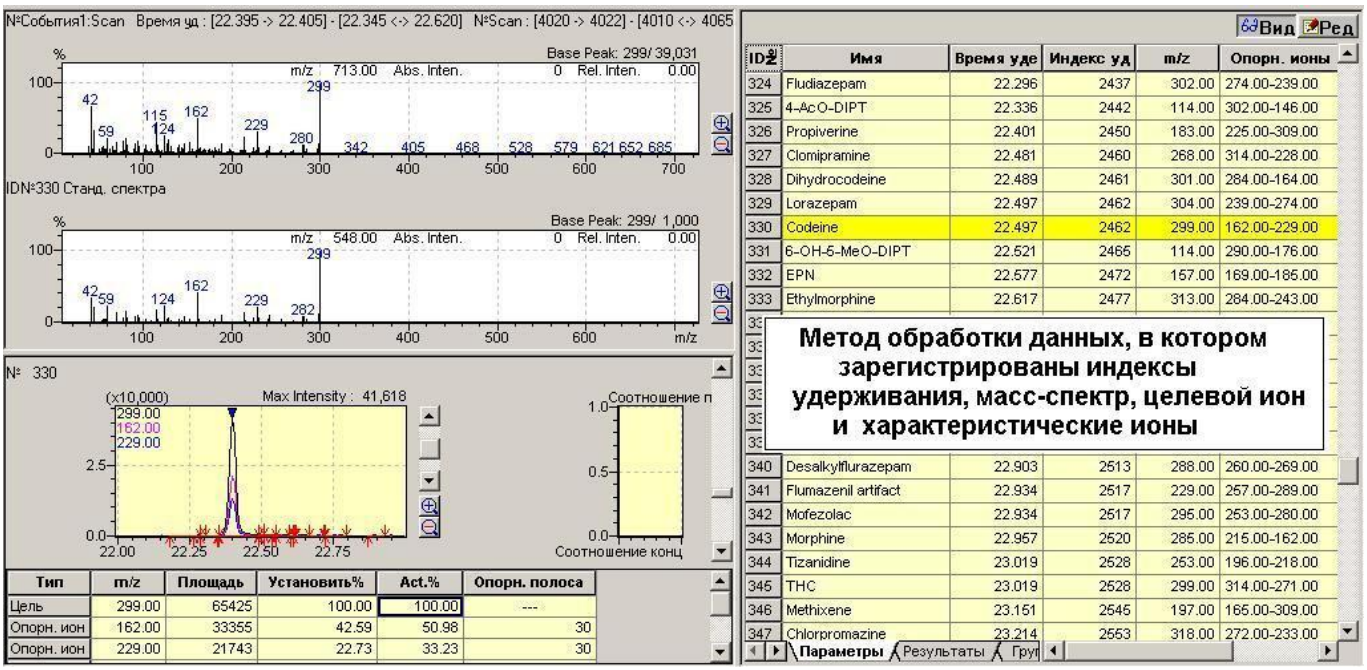
Библиотека содержит 1011 масс-спектров токсикологических веществ. Идентификация с высокой степенью достоверности обеспечивается подтверждением результатов поиска масс-спектров соответствием их индексов удерживания значениям в библиотеке. Индексы удерживания зарегистрированных компонентов содержатся в файле метода, времена удерживания компонентов могут быть определены. Кроме того, зарегистрированы характеристические ионы, что позволяет простое определение компонентов проб непосредственно по масс-хроматограмме.

- библиотека масс-спектров с индексами удерживания:



Даже при определении целевого компонента среди веществ, имеющих сходный масс-спектр, он может быть идентифицирован на основании данных об индексах удерживания, что повышает его точность определения.

Например, ТМС-производные лекарств, содержащих наркотики, имеют сходные масс-спектры и многие соединения могут быть распознаны как кандидаты целевого вещества при поиске по библиотеке масс-спектров. Однако, когда соединения подвергаются библиотечному поиску по временам удерживания, определяется единственный целевой компонент.

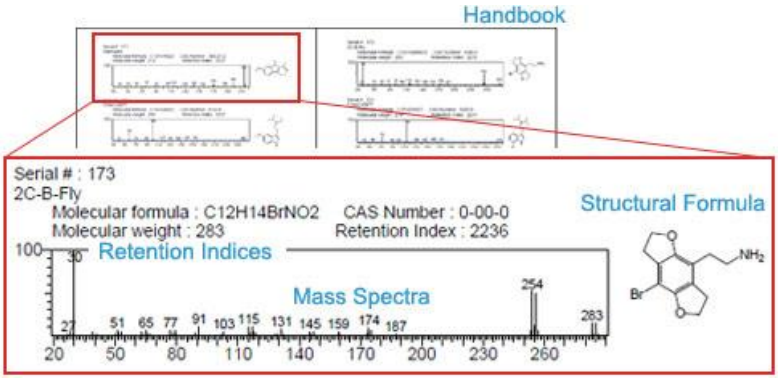


Информация для каждого компонента (индекс удерживания, ион, масс-спектр и т.д.) задается методом анализа, а время удерживания может быть с легкостью оценено при помощи функции AART[3] (автоматическая оценка времени удерживания) в программе GCMSsolution.

Это значительно сокращает время и усилия, затрачиваемые на сбор информации соединения.

[3] Расчет времени удерживания проводится однократно с использованием стандартов н-алканов, которые поставляются в комплекте с Токсикологической базой данных.

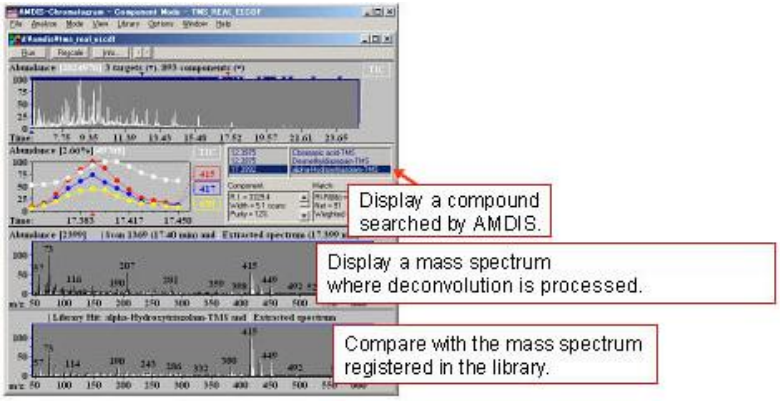
Масс-спектр и компоненты, зарегистрированные в библиотеке, собраны в пособии «Handbook». Масс-спектры, индексы удерживания и структурная формула также могут быть проверены при помощи функции поиска введением в строку поиска: имени на английском языке, регистрационного номера, индекса удерживания, молекулярной массы, представленных в пособии «Handbook».



Б. Программа деконволюции и дополнительные возможности программ Шимадзу

Библиотека масс-спектров, содержащаяся в базе данных, может быть использована в качестве библиотеки для программы AMDIS[4] (в формате *.msp) от NIST (Национальный Институт Стандартов и Технологии). Программа AMDIS позволяет идентифицировать целевые соединения и определять неизвестные соединения при помощи функции деконволюции масс-спектра. Полученные масс-хроматограммы в методе анализа Токсикологической базы данных можно дополнительно обсчитать в программе деконволюции в том числе с использованием индексов удерживания.

Программное обеспечение GCMSSolution Шимадзу позволяет производить автоматическую конвертацию полученных масс-хроматограмм в открытый формат записи данных *.cdf. В результате использование данных решений, позволяет просто и удобно проводить качественный анализ в программе AMDIS. Кроме того, целевую библиотеку масс-спектров Токсикологической базы данных можно объединить с другими целевыми библиотеками, имеющимися у пользователя или поставляемыми дополнительно (например, DesignerDrugs, MPW2011) для проведения качественного анализа с использованием программы деконволюции или без.



С программным обеспечением Шимадзу может быть поставлена специальная программа, которая позволяет конвертировать библиотеки или масс-хроматограммы из формата Шимадзу в формат NIST и обратно. **Таким образом, пользователь может на программном обеспечении хроматомасс-спектрометра GCMS-QP2010Ultra/SE проводить идентификацию по библиотеке Токсикологической базы данных масс-хроматограмм, полученных на приборах других производителей.**

[4] Автоматическая Система Масс - Спектральной Деконволюции и Идентификации