

Стандартные образцы и библиотеки масс-спектров наркотических веществ

Е.В. Кулябина, Ф.В. Булыгин, А.Д. Козлов, С.С. Барсегян,
В.А. Колобаев, А.А. Кирилук, Т.В. Кулябина,
О.Н. Мелкова, В.В. Морозова
ФГБУ «ВНИИМС»

kuliabina@vniims.ru

+7 (495) 781 44 13, +7 (916) 543 60 42

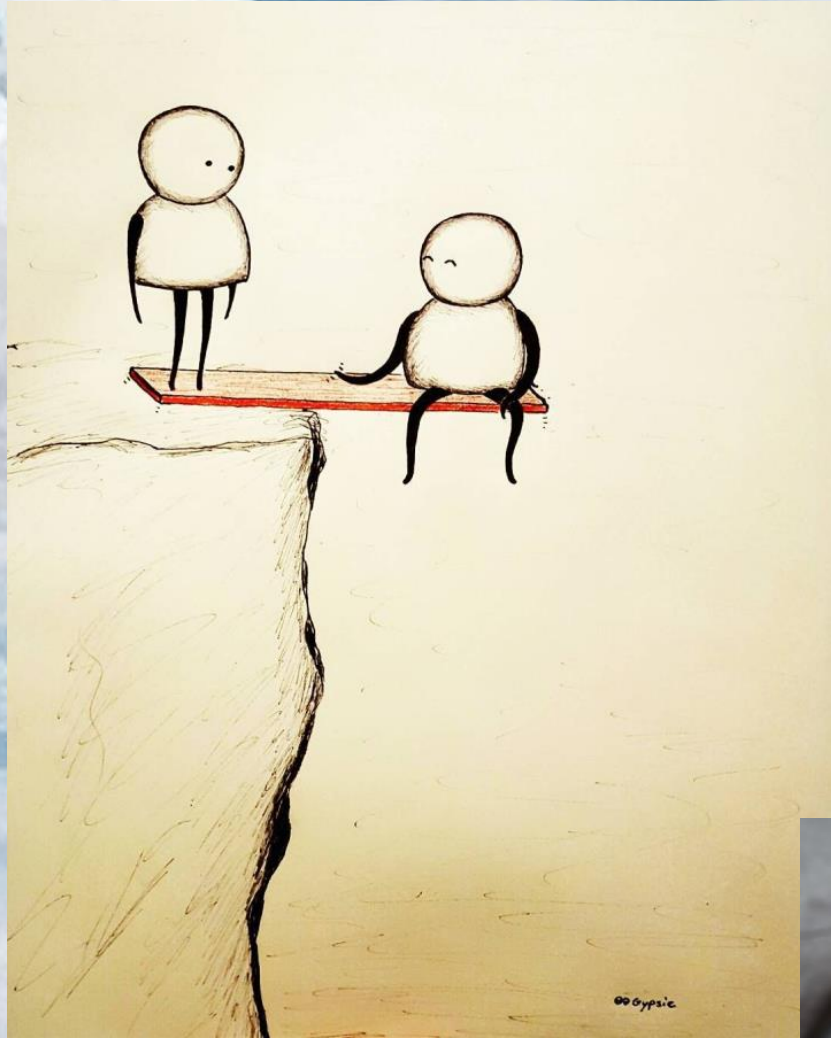


Содержание

1. Актуальность
2. Перечень наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров, подлежащих контролю в Российской Федерации
3. Вопросы приобретения и применения СО наркотических средств
4. Роль СО наркотических средств
5. Мнения заинтересованных сторон о российской библиотеке масс-спектров
6. Блок-схема взаимодействия организаций по созданию библиотеки масс-спектров
7. Примеры существующих библиотек масс-спектров
8. НПА РФ
9. Методы анализа для составления итогового Перечня веществ
10. Вещества, выбранные для основы создаваемой библиотеки масс-спектров
11. Оформление данных в наших таблицах ГСССД
12. Требования к библиотеке
13. Бюджет неопределенности
14. База данных ФГБУ «ВНИИМС» – «Масс-спектры лекарственных препаратов, наркотических и токсических веществ»
15. Потребители и партнеры



1. Актуальность



ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ПОСТАНОВЛЕНИЕ
от 30 июня 1998 г. N 681
ОБ УТВЕРЖДЕНИИ ПЕРЕЧНЯ НАРКОТИЧЕСКИХ СРЕДСТВ,
ПСИХОТРОПНЫХ ВЕЩЕСТВ И ИХ ПРЕКУРСОРОВ,
ПОДЛЕЖАЩИХ КОНТРОЛЮ В РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

(в ред. Постановлений Правительства РФ от 06.02.2004 N 51, от 17.11.2004 N 648, от 08.07.2006 N 421, от 04.07.2007 N 427, от 22.06.2009 N 507, от 21.12.2009 N 1042, от 31.12.2009 N 1186, от 21.04.2010 N 255, от 03.06.2010 N 398, от 30.06.2010 N 486, от 29.07.2010 N 578, от 30.10.2010 N 882, от 27.11.2010 N 934, от 08.12.2010 N 990, от 25.02.2011 N 112, от 11.03.2011 N 158, от 07.07.2011 N 540, от 07.07.2011 N 547, от 06.10.2011 N 822, от 08.12.2011 N 1023, от 22.02.2012 N 144, от 03.03.2012 N 169, от 23.04.2012 N 359, от 18.05.2012 N 491, от 04.09.2012 N 882, от 01.10.2012 N 1003, от 19.11.2012 N 1178, от 23.11.2012 N 1215, от 04.02.2013 N 78, от 26.02.2013 N 157, от 13.06.2013 N 496, от 10.07.2013 N 580, от 09.09.2013 N 788, от 07.11.2013 N 998, от 16.12.2013 N 1159, от 22.03.2014 N 224, от 31.05.2014 N 498, от 23.06.2014 N 578, от 25.10.2014 N 1102, от 09.12.2014 N 1340, от 27.02.2015 N 174, от 09.04.2015 N 328, от 08.05.2015 N 448, от 02.07.2015 N 665, от 12.10.2015 N 1097, от 01.04.2016 N 256, от 18.01.2017 N 26, от 21.02.2017 N 216, от 25.05.2017 N 631, от 12.07.2017 N 827, от 29.07.2017 N 903, от 28.03.2018 N 337, от 22.06.2018 N 718, от 19.12.2018 N 1598, от 22.02.2019 N 182, от 09.08.2019 N 1041, от 12.02.2020 N 136, от 13.03.2020 N 275, от 29.07.2020 N 1140, от 03.12.2020 N 2007, от 20.12.2021 N 2367, от 24.01.2022 N 31, от 15.06.2022 N 1074)

[свернуть](#)

В соответствии с Федеральным [законом](#) "О наркотических средствах и психотропных веществах" (Собрание законодательства Российской Федерации, 1998, N 2, ст. 219) Правительство Российской Федерации постановляет:

Утвердить прилагаемый перечень наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров, подлежащих контролю в Российской Федерации.

2. Перечень наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров, подлежащих контролю в Российской Федерации

Список 4 - прекурсоров, оборот которых в Российской Федерации ограничен и в отношении которых устанавливаются *меры контроля* в соответствии с законодательством Российской Федерации и международными договорами Российской Федерации.

Список 1

Список 1 - наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров, оборот которых в Российской Федерации *запрещён* в соответствии с законодательством Российской Федерации и международными договорами Российской Федерации

Список 4

Список 2

Список 3 - психотропных веществ, оборот которых в Российской Федерации ограничен и в отношении которых *допускается исключение некоторых мер контроля* в соответствии с законодательством Российской Федерации и международными договорами Российской Федерации

Список 3

Список 2 - наркотических средств и психотропных веществ, оборот которых в Российской Федерации ограничен и в отношении которых устанавливаются *меры контроля* в соответствии с законодательством Российской Федерации и международными договорами Российской Федерации

Суммарно **434** субстанции плюс изомеры (если таковые определённо не исключены) наркотических средств и психотропных веществ в тех случаях, когда существование таких изомеров возможно и соли указанных веществ, если существование таких солей возможно

3. Вопросы приобретения и применения СО наркотических средств



4. Роль СО наркотических средств

Роль СО

определение пределов обнаружения измерительных тест-систем, применяемых для предварительных методов анализа

определение селективности и чувствительности тест-систем

контроль точности при разработке и валидации методик измерений

поверка и калибровка средств измерений

осуществление химико-токсикологических, экспертных и клинико-диагностических исследований

5. Мнения заинтересованных сторон о российской библиотеке масс-спектров

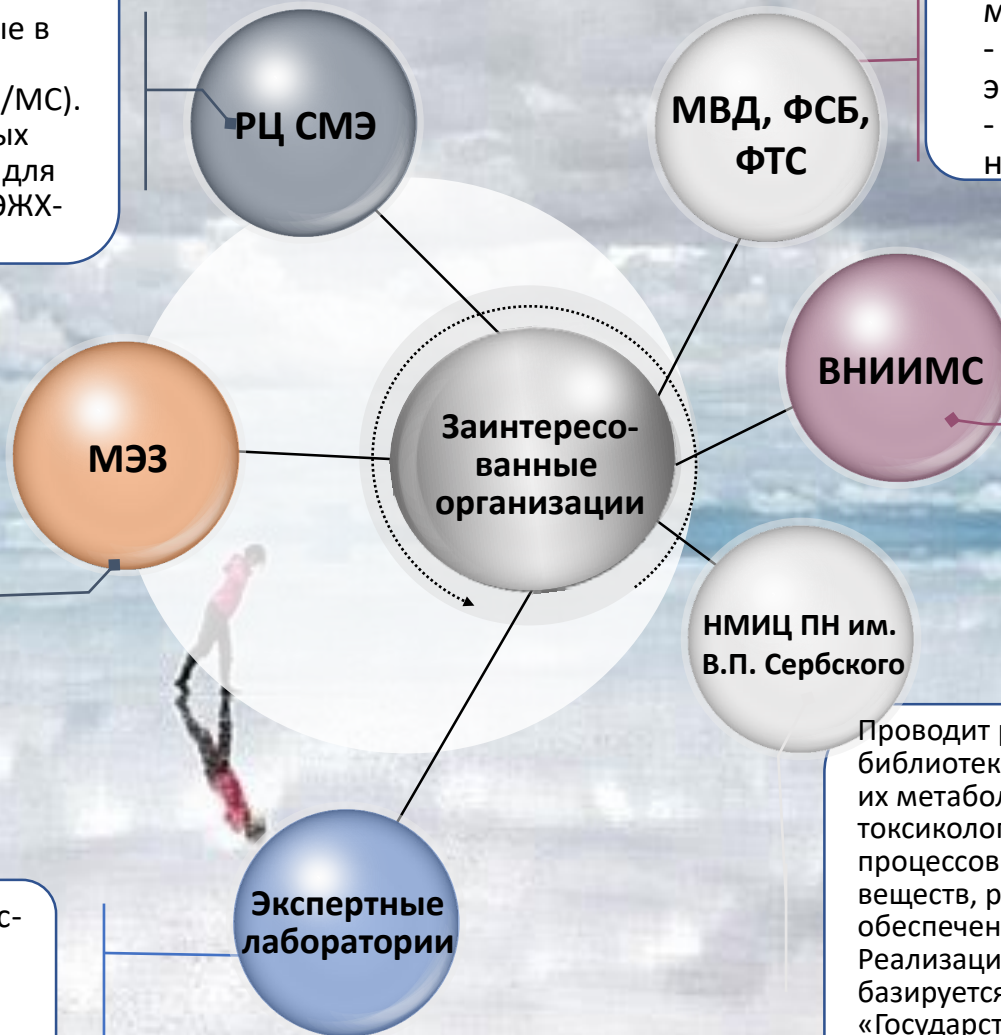
Следует разделять библиотеки масс-спектров на две основные группы.

1. Библиотеки масс-спектров, используемые в газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием (ГХ/МС).
2. Библиотеки масс-спектров для тандемных масс-спектрометров, использующих ВЭЖХ для предварительного разделения веществ (ВЭЖХ-МС/МС)

Для создания национальной библиотеки масс-спектров наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров, как источника справочных данных, необходимо внесение изменений в ст 1, 15 и 35 ФЗ от 08.01.1998 г. № 3-ФЗ «О наркотических средствах и психотропных веществах». У предприятия имеется лицензия на деятельность по обороту наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров.

Предприятие – основной производитель ГСО нарк. средств

Библиотека или база данных масс-спектров остро необходима для осуществления диагностики контролируемых веществ в биологическом материале

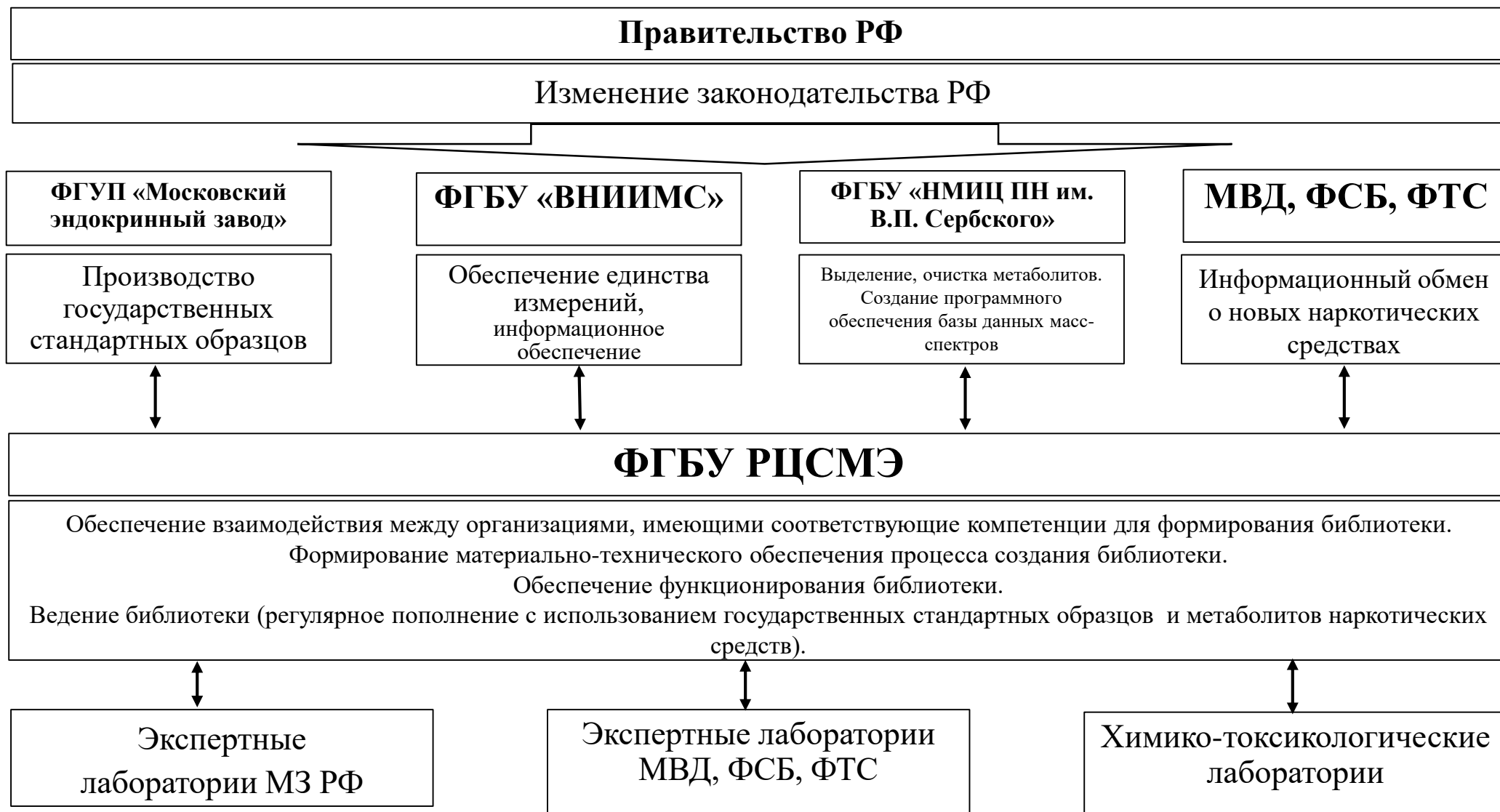


Библиотека должна соответствовать требованиям: - масс-спектры должны быть достоверными... - ПО должно быть совместимым с используемым в экспертных подразделениях оборудованием... - должны оперативно включаться масс-спектры новых психоактивных соединений...

- обеспечение оценки достоверности представленных данных;
- обеспечение оценки метрологической прослеживаемости результатов измерений;
- разработка и аттестация методик измерений;
- участие в разработке и испытания стандартных образцов утвержденных типов;
- экспертиза документации;
- разработка порядка (Рекомендации по метрологии) оперативного пополнения Библиотеки в рамках ГСССД с размещением ее в разделе ГСССД на сайте ФГБУ «ВНИИМС»;
- аттестация и утверждение стандартных и рекомендуемых справочных данных масс-спектров;
- аттестация Библиотеки (базы данных масс-спектров)

Проводит работы для разработки алгоритма введения в российскую библиотеку масс-спектров информации о контролируемых веществах и их метаболитах, полученных при проведении химико-токсикологического исследования биологического материала, изучение процессов биотрансформации наркотических средств и психотропных веществ, разработка методических основ метрологического обеспечения при проведении химико-токсикологического анализа. Реализация плана по созданию российской библиотеки масс-спектров базируется на основных принципах, описанных в ГОСТ Р 8.795-2012 «Государственная система обеспечения единства измерений. Методики идентификации химических веществ методом хромато-масс-спектрометрии. Общие требования».

6. Блок-схема взаимодействия организаций по созданию библиотеки масс-спектров



7. Примеры существующих библиотек масс-спектров

NIST

Search NIST



Menu

PROJECTS/PROGRAMS

NIST20: Updates to the NIST Tandem and Electron Ionization Spectral Libraries

Summary

The latest release of the NIST Mass Spectral Library, which includes the [NIST Tandem Mass Spectral Library](#) and [NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library](#) and NIST GC Retention Index Database greatly increases the number of compounds and spectra since the 2017 version. The new versions, NIST20, [are available from distributors](#) for integration with existing instrumentation.

DESCRIPTION

NIST Tandem Mass Spectral Library, 2020 release

- 31,000 compounds
 - 186,000 precursor ions
 - Twice as many as the 2017 release
 - 1.3 million spectra
- Fragmentation methods**
- 27,840 HRAM (high res accurate mass) compounds
 - 29,890 QTOF, HCD, IT-HRAM, QqQ compounds
 - 29,444 ion trap compounds (low res., up to MS⁴)
 - 246 APCI HRAM "extractables and leachables"
- Precursor ion types**
- 26,575 protonated
 - 12,589 deprotonated
 - 10,032 water/ammonia loss
 - 34,199 other in-source generated

Wide variety of compounds

ORGANIZATIONS

Material Measurement Laboratory
Biomolecular Measurement Division
Mass Spectrometry Data Center Group

PROJECT STATUS

ONGOING

RELATED NIST PROJECTS

[Tandem Mass Spectral Library](#)
[Electron Ionization Library Component of the NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library and NIST Retention Index Database](#)
[Peptide Mass Spectral Libraries](#)

OTHER PROJECTS

[Mass Spectrometry Data Center](#)
[NIST Chemistry WebBook](#)

RF-Des_drug
Масс-спектрометрические базы данных

spectrabase.com/spectrum/

SpectraBase™

Log In WILEY

Cite Share Follow Feedback About

Free Spectral Database

Free, fast text access to hundreds of thousands of NMR, IR, Raman, UV-Vis, and Mass Spectra.

Search a compound by name, InChI, InChIKey, CAS Registry Number, or [Draw a Structure](#)

Елена Кулябина
Не является пользователем ПО.

Профиль пользователя Оповещения Выход

Отчет

о тенденциях рынка психоактивных веществ, составленный на основе статистических данных АИПСИН Мониторинг

1 квартал 2022 года
Авторы: Петецкая А. В., Юрченко Р. А.

О последних тенденциях рынка психоактивных веществ

Представлен новый отчет о последних тенденциях рынка психоактивных веществ

15 июня 2022 г. 12:17

Лента новостей

Украинцев посадят на психотропные препараты

Руководство Украины хочет легализовать марихуану и готовится раздавать гражданам психотропные препараты

2022-06-08 11:35

Россия проводит "дематодонизацию" Украины

Для получения обновлений Вам необходимо ввести номер ключа защиты АИПСИН в профиль пользователя

ИНФОРМАЦИЯ

ВАХ И
05_2022

<https://aipgin.com/news/378/>

ХРОМАТЭК

NIST MS Search 2.0 - [MS/MS, Presearch Default - 19 spectra]

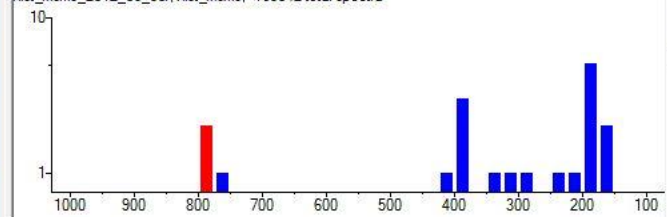
File Search View Tools Options Window Help

m/z

1. 110212_1950 70% EtOH_5uL_175V_1

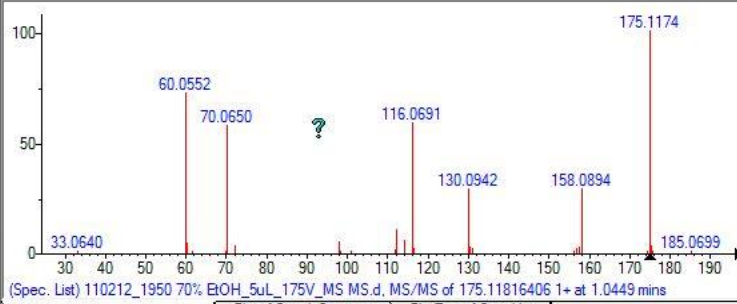
#	Source	Name
86	Spec.	110212_1950 70% EtOH_5uL_175V_1
87	Spec.	110212_1950 70% EtOH_5uL_175V_1
88	Spec.	110212_1950 70% EtOH_5uL_175V_1
89	Spec.	110212_1950 70% EtOH_5uL_175V_1
90	Spec.	110212_1950 70% EtOH_5uL_175V_1
91	Spec.	110212_1950 70% EtOH_5uL_175V_1
92	Spec.	110212_1950 70% EtOH_5uL_175V_1
93	Spec.	110212_1950 70% EtOH_5uL_175V_1
94	Spec.	110212_1950 70% EtOH_5uL_175V_1

nist_msms_2012_05_30r_nist_msms: 163042 total spectra



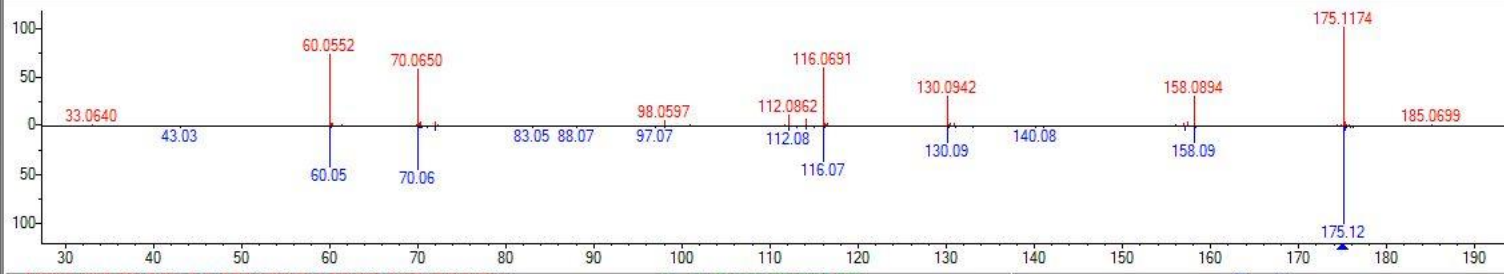
#	Library	Score	Dot Pro...	Prob. (%)	Name
1	nist_m...	792	900	36.6	DL-arginine
2	nist_m...	786	897	28.8	L-Arginine
3	nist_m...	767	886	14.0	Ser-Ser-Arg
4	nist_m...	419	631	0.00	N-α-Acetyl-L-ornithine
5	nist_m...	398	610	0.00	Ala-Thr-Arg
6	nist_m...	389	601	0.00	N5-(1-Iminoethyl)-L-ornithine
7	nist_m...	380	592	0.00	Thr-Ala-Arg
8	nist_m...	328	536	0.00	L-Thiocitrulline
9	nist_m...	312	518	0.00	Guanidinosuccinic acid
10	nist_m...	283	483	0.00	L-Citrulline
11	nist_m...	235	421	0.00	N-Carboxyethyl-γ-aminobutyric acid
12	nist_m...	201	373	0.00	Ser-Ser
13	nist_m...	199	371	0.00	Dimethylallylglycine
14	nist_m...	194	363	0.00	N-Acetyl-L-aspartic acid
15	nist_m...	192	361	0.00	Ser-Leu-Lys
16	nist_m...	188	354	0.00	Ala-Cys-Arg
17	nist_m...	178	340	0.00	Cys-Pro-Lys
18	nist_m...	169	326	0.00	Ser-Ile-Lys
19	nist_m...	158	309	0.00	N-(tert-Butoxycarbonyl)glycine

Names Structures Hit List



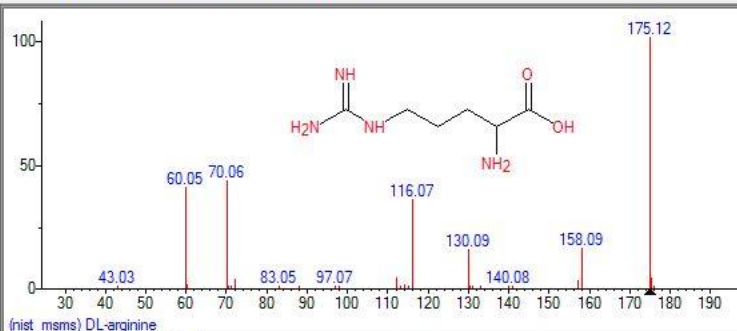
(Spec. List) 110212_1950 70% EtOH_5uL_175V_MS MS.d, MS/MS of 175.11816406 1+ at 1.0449 mins

Plot/Text of Search Spectrum Plot of Search Spectrum Plot/Text of Spec List



110212_1950 70% EtOH_5uL_175V_MS MS.d, MS/MS of 175.11816406 1+ DL-arginine 792 900R 36.6P

Difference Head to Tail Side by Side Subtraction



(nist_msms) DL-arginine

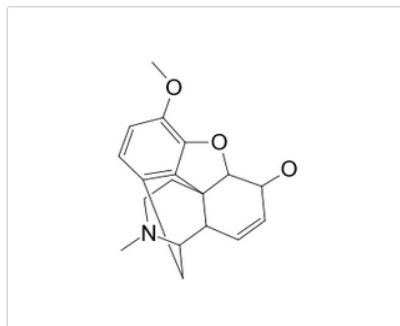
Plot/Text of Hit Plot of Hit

Name: 110212_1950 70% EtOH_5uL_175V_MS MS.d, MS/MS of 175.11816406 1+ at 1.0449 mins
 MW: N/A ID#: 93 DB: Spec. List
 Comment: Parent=175.1182 Charge=1 RTINSECONDS=62.694
 10 largest peaks:
 175.1174 999.00 | 60.0552 715.21 | 116.0691 586.74 | 70.0650 569.78 | 158.0894 290.44 |
 130.0942 287.90 | 112.0862 108.13 | 114.1010 55.21 | 98.0597 50.04 | 60.1048 44.87 |
 63 m/z Values and Intensities:
 33.0640 10.36 | 60.0552 715.21 | 60.1048 44.87 | 60.1245 37.10 | 60.2544 18.98 |
 60.3058 17.40 | 61.4531 9.92 | 69.9686 9.51 | 70.0650 569.78 | 70.1340 15.55 |
 70.1614 12.96 | 70.1794 11.62 | 70.2411 13.42 | 70.2649 19.27 | 70.2952 29.72 |
 70.3291 15.54 | 72.0866 30.39 | 72.2646 8.73 | 98.0597 50.04 | 98.1071 10.35 |
 100.9490 11.34 | 111.7473 12.77 | 112.0862 108.13 | 114.1010 55.21 | 116.0691 586.74 |
 116.1430 20.76 | 116.1638 16.30 | 116.1965 12.51 | 116.2367 13.86 | 116.2934 8.84 |
 116.3650 11.32 | 116.4144 12.65 | 116.4667 19.49 | 130.0942 287.90 | 130.1941 10.68 |
 130.2891 9.51 | 130.4547 27.23 | 130.8670 22.73 | 156.1079 10.36 | 156.9503 19.84 |
 157.4271 29.53 | 157.4557 10.37 | 158.0894 290.44 | 158.2107 9.11 | 174.3084 12.11 |
 174.8600 11.80 | 175.1174 999.00 | 175.2268 31.99 | 175.3059 8.68 | 175.3590 9.66 |

Name: DL-arginine
 Formula: C₆H₁₄N₄O₂
 MW: 174 Exact Mass: 174.111675 CAS#: 7200-25-1 NIST#: 1057485 ID#: 19695 DB: nist_msms
 Other DBs: None
 Comment: NIST Mass Spectrometry Data Center
 Precursor m/z: 175.1190
 Instrument type: Q-TOF
 Spectrum type: ms2
 Compound type: M
 Precursor type: [M+H]⁺
 Collision energy: 10.00V
 Instrument: Agilent QTOF 6530
 Sample inlet: direct flow injection
 Ionization: ESI
 Ion mode: P
 Collision gas: N2
 In-source voltage: 150V

◀ Codeine

View entire compound with free spectra: 1 MS



SpectraBase Compound ID JJ0pJdK58c

InChI InChI=1S/C18H21NO3
/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19
/h3-6,11-13,17,20H,7-9H2,1-2H3/t11?,12-,13?,17?,18-/m/s1

InChIKey OROGSEYTTFOCAN-YBHPCWFYSA-N

[Google Search](#)

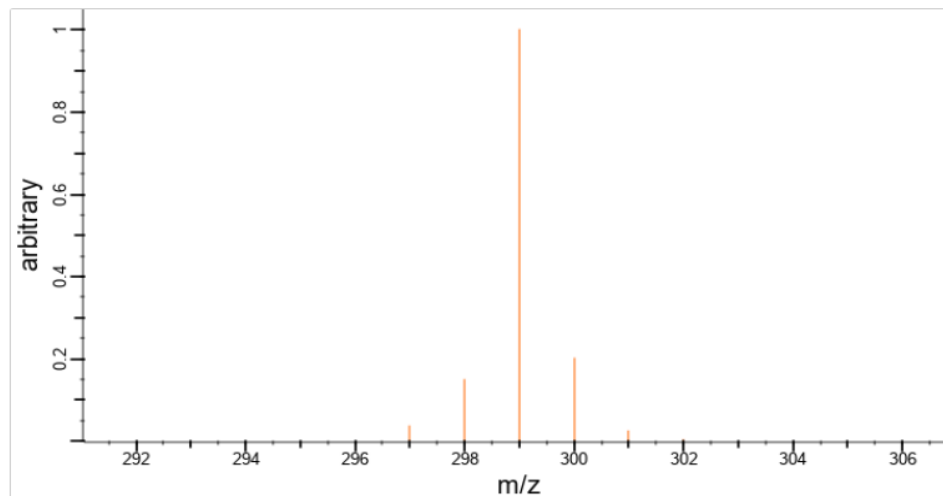
Mol Weight 299.37 g/mol

Molecular Formula C18H21NO3

Exact Mass 299.152144 g/mol

Mass Spectrum (MS)

View the Full Spectrum for FREE!



9. Методы анализа для составления итогового Перечня веществ

1. Анализ опыта реализованных проектов

Анализ архивной документации
Анализ лучших практик
Контрольные списки

2. Анализ текущего проекта

Анализ текущей документации
Контрольные списки
Анализ сетевых графиков и планов по проекту

3. Анализ возможных будущих условий

SWOT Анализ

RCA Анализ основной
причины

Экспертные
методы

Диаграмма Исикавы

PESTLE, STEEP, STEEPLD

Мозговой штурм, МНГ, Метод Дельфи,
Опросы, интервью, анкетирование

Диаграмма Влияния

Дерево решений

Метод экспертных оценок. Требования к экспертам

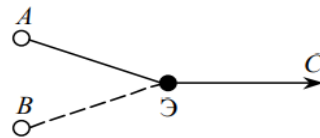
Эксперты, на мнении которых базировалось составление Перечня веществ, должны были удовлетворять нижеприведенным требованиям. Получение объективных оценок от экспертов базировалось на следующих положениях:

- 1) аксиома **несмещённости**, которая утверждает, что мнение большинства компетентно;
- 2) аксиома **транзитивности**, утверждающая, что субъективные оценки транзитивны.

Из этого следует, что мерой качества субъективных оценок является их рассеяние.

Были учтены особенности субъективной оценки эксперта. Если эксперт в чем-либо лично заинтересован или считает популярным определенное мнение, то его экспертная оценка может отражать эту конъюнктуру. Таким образом, соблюдалось требование к способности эксперта противостоять воздействию конъюнктуры – **объективность** – один из важнейших факторов, определяющих достоверность субъективной оценки.

Было принято решение, определение субъективной оценки C поручать одному эксперту \mathcal{E} , который основывает оценку на информации, полученной из двух независимых источников A и B . Эксперт выдаёт оценку C только в том случае, когда оба источника дают одинаковую информацию.



Пусть каждый источник информации обеспечивает правильную оценку с какой-то вероятностью (например 2 источника информации с вероятностью 0,7). Она обусловлена компетентностью источника информации.

Предположим, что эксперт ошибается один раз из двухсот. Тогда вероятность правильной субъективной оценки эксперта, обусловленная его компетентностью и информированностью о характере поставленной перед ним задачи $P_c = 0,995$.

Метод экспертных оценок. Требования к экспертам

Отсюда общая вероятность правильности субъективной оценки, данной экспертом, равна

$$P_1 = P_c \cdot \frac{\sum_{i=1}^n p_i}{n},$$

где P_c – вероятность правильной субъективной оценки эксперта, обусловленная компетентностью эксперта и его информированностью о характере поставленной перед ним задачи, то есть это характеристика эксперта, которая остается неизменной;

$\sum_{i=1}^n p_i$ – сумма вероятностей правильных оценок от всех n источников информации;
 n – количество источников информации.

Тогда общая вероятность правильности субъективной оценки, данной экспертом:

$$P_1 = 0,995 \cdot \frac{0,7+0,7}{2} = 0,6965,$$

а вероятность выдачи им ошибочной оценки:

$$P_2 = 1 - 0,6965 = 0,3035.$$

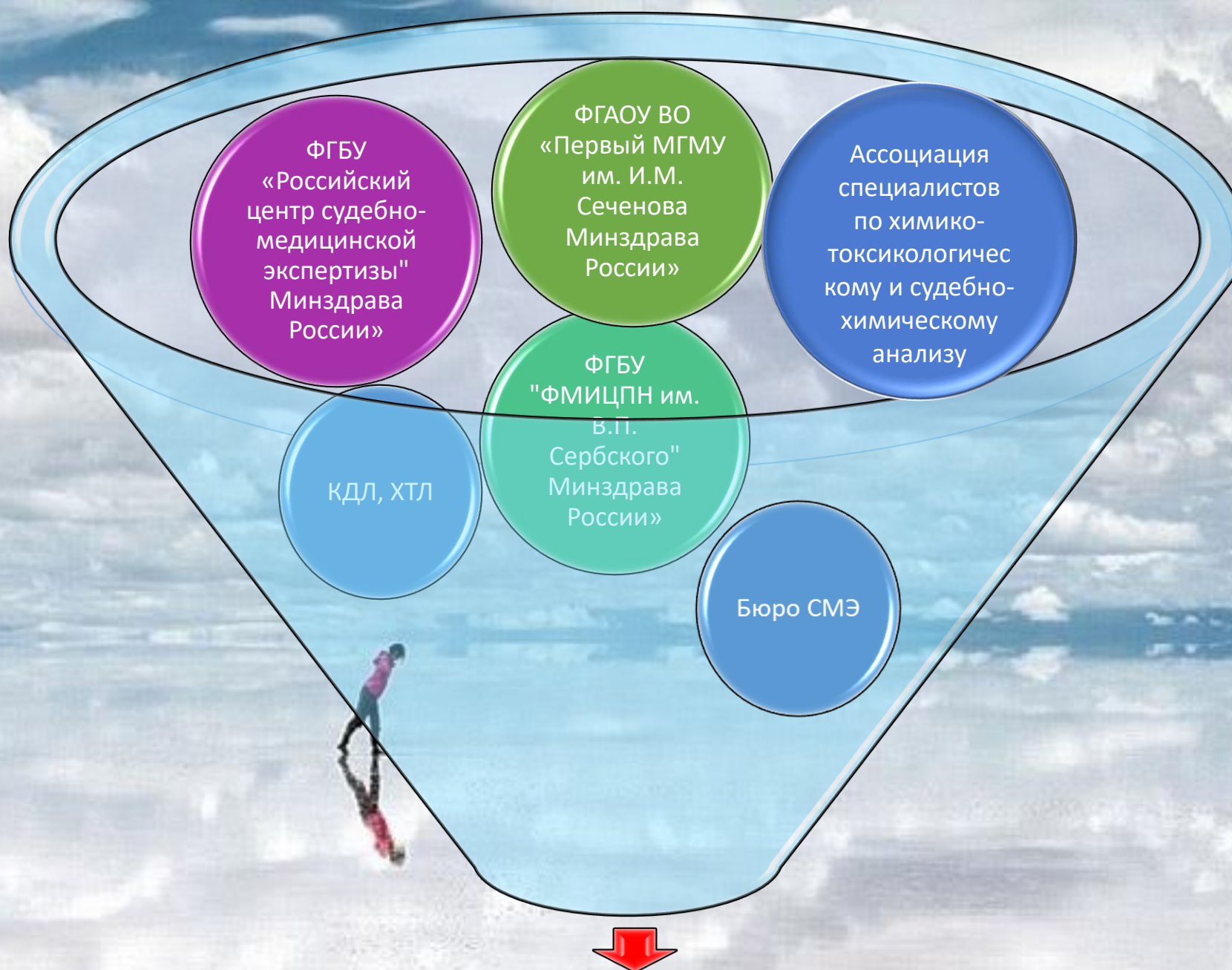
Если мы имеем несколько источников информации, и каждый из них обеспечивает правильную оценку со своей вероятностью – например 1, 1, 0,7, 0,7, то получаем:

$$P_1 = 0,995 \cdot \frac{1+1+0,7+0,7}{4} = 0,8458,$$

а вероятность выдачи им ошибочной оценки:

$$P_2 = 1 - 0,8458 = 0,1542.$$

Таким образом, если эксперт C использует для принятия решения источники информации с более высокой вероятностью правильной оценки, то общая вероятность правильности субъективной оценки, данной этим экспертом, возрастает.



Перечень наркотических и токсичных веществ, применяемых для обеспечения единства измерений в экспертно-криминалистической деятельности

10. Вещества, выбранные для основы создаваемой библиотеки масс-спектров

Группа 1 – снотворные, седативные и антидепрессанты

1. 1-гидрокси-мидазолам
2. Карисопродол
3. Оксазепам
4. Зопиклон
5. Дифенгидрамин
6. Кломипрамин
7. Бупропион
8. Норкотинин
9. Дезипрамин
10. Доксепин

Группа 2 – селективные ингибиторы обратного захвата серотонина.

11. Циталопрам
12. Флуоксетин
13. Десметилвенлафаксин

Группа 3 – неизбирательные блокаторы м-холинорецепторов.

14. Атропина сульфат (моногидрат)
15. Скополамин

Группа 4 – Психотропные субстанции.

16. Теофиллин
17. Ламотриджин

Группа 5 – «дневные» анксиолитики.

18. Медазепам
19. Тофизолам

Группа 6 – нейролептики (антипсихотики).

20. Дроперидол
21. Флуфеназин

Группа 7 – атипичные антипсихотики.

22. Тиоридазин
23. Оланзапин

Группа 8 – наркотики.

24. Носкапин
25. Папаверин

Группа 9 – психостимуляторы и антидепрессанты.

26. Мапротилин
27. Миртвапин
28. Десметилвенлафаксин
29. Протриптилин

Группа 10 – Лекарственные препараты, содержащие сильнодействующие вещества.

30. Тригексифенидил
31. Ниметазепам

32. Нандролон

Группа 11 – Лекарственные препараты, содержащие биологически-активные вещества, токсиканты.

33. Дигоксин
34. Лидокаин
35. Селегилин
36. Пентоксифиллин
37. Кларитромицин

38. Дилтиазем

39. Флуфенамовая кислота

40. Метотрексат

41. Метилпарабен

42. Нифедипин

43. Нимесулид

Группа 12 – Препараты и сильнодействующие препараты.

44. Антраниловая кислота

45. Вальпроевая кислота

46. Эналаприл

47. Циннаризин

48. Пиперидин

49. Налтрексон

Группа 13 – лекарственные препараты, прием которых должен контролироваться (ограничен) при деятельности, требующей повышенного внимания и быстрых психомоторных реакций.

50. Диклофенак

51. Кеторолак

52. Кетопрофен

53. Метоклопрамид

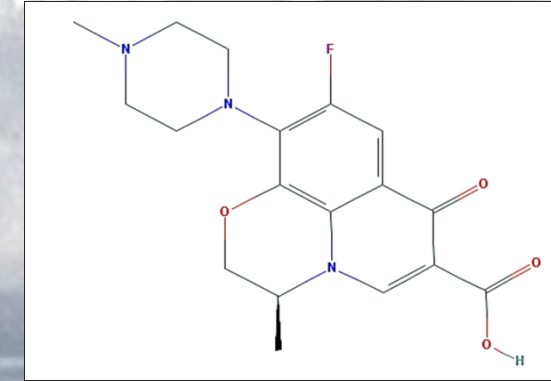
Группа 14 – нейрометаболические стимуляторы

54. Пирацетам

55. Фенибут

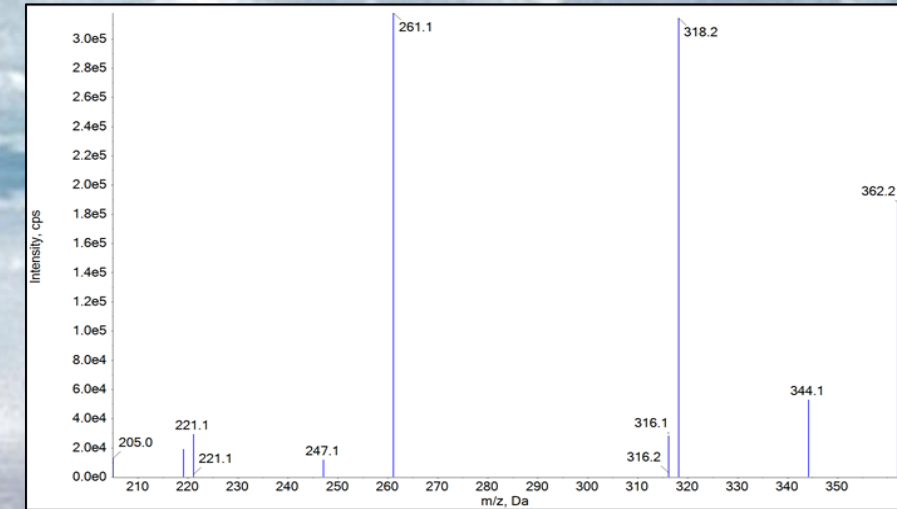
11. Оформление данных в наших таблицах ГСССД

Характеристика	Значение
Наименование вещества	Левифлоксацин (Levofloxacin)
Группа веществ	Антибиотики
Структурная формула вещества	Рисунок 1
Молекулярная формула вещества	$C_{18}H_{20}FN_3O_4$
Молекулярная масса вещества	361.3731
Молекулярная масса моноизотопа	361.1438
CAS номер вещества	100986-85-4
Спектр в виде изображения	Рисунок 2 Ось ординат: интенсивность Ось абсцисс: отношение массы к заряду иона



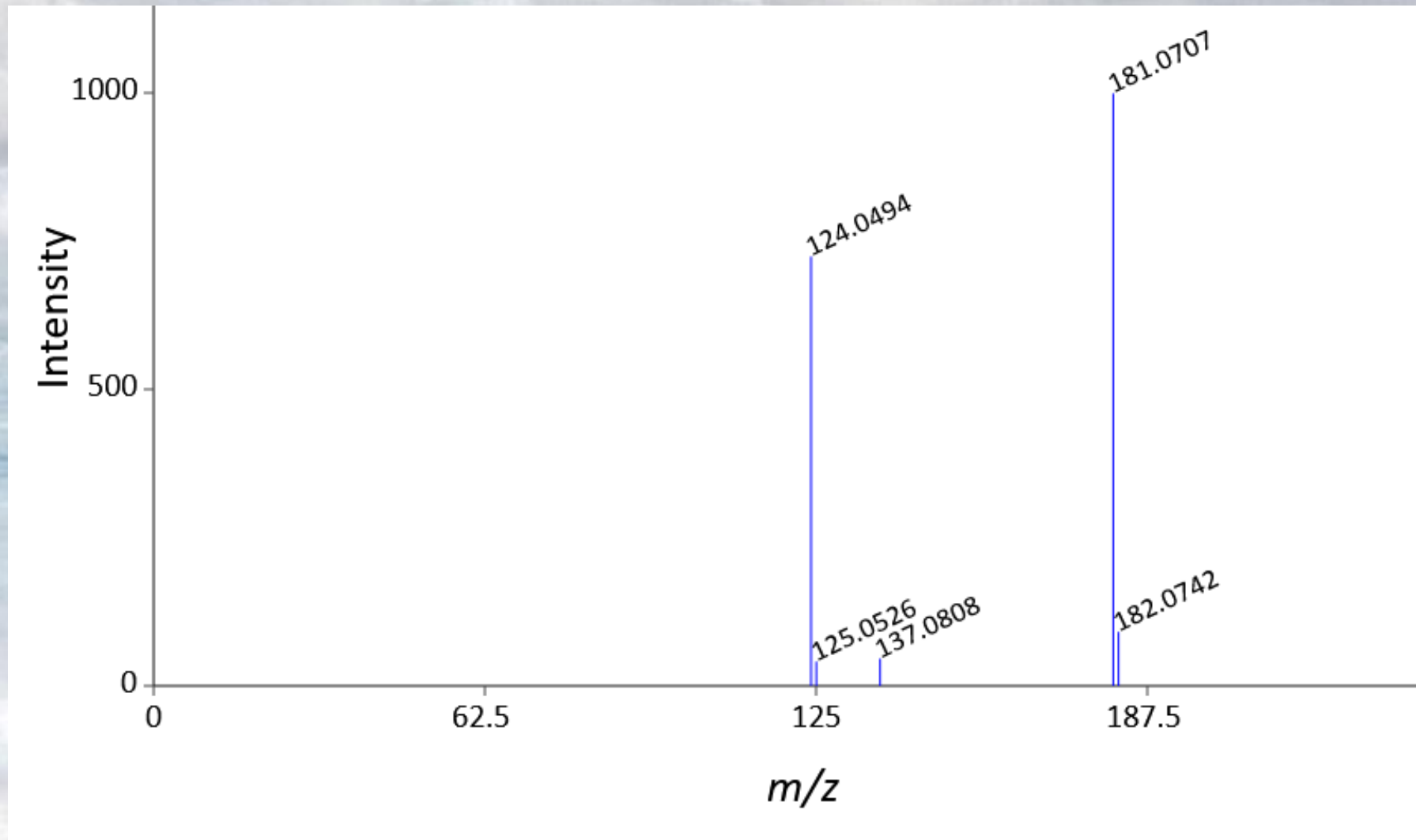
Структурная формула

Тип прибора (номер ФИФ, детектор)	Масс-спектрометр «Pte. Ltd.» (номер 17)	Отношение массы к заряду (m/z), а.е.м	Интенсивность, число импульсов в секунду
	Энергия фрагментации	205,0405	$0,1 \cdot 10^5$
Условия получения спектра	Полярность: положительная Приведены в таблице	221,0726	$0,3 \cdot 10^5$
Ион предшественник	362.15 а.е.м.	221,0802	$0,02 \cdot 10^5$
		247,0877	$0,1 \cdot 10^5$
		261,1041	$3,2 \cdot 10^5$
		316,1463	$0,3 \cdot 10^5$
		316,1553	$0,05 \cdot 10^5$
		318,1619	$3,1 \cdot 10^5$
		344,1407	$0,5 \cdot 10^5$
		362,1514	$1,9 \cdot 10^5$



Масс-спектр

Масс-спектр теофилина



Сертификаты анализируемых веществ

LoGiCal®

Produced by LGC

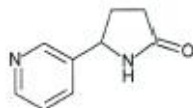
Certificate of Analysis

Reference Material - Primary Standard

Product Name: rac-Norcotinine 1.0 mg/ml in Methanol

Catalogue Number: LGCAMP0517.14-01
Lot Number: 65310

CAS Number: 17708-87-1
Molecular Formula: $C_9H_{10}N_2O$
Molecular Weight: 162.19
Solvent: Methanol
Volume per Ampoule: not less than 1 ml¹



Long-term Storage: -18 °C, dark

Expiry Date: January-2020

Intended Use: The primary aim of this material is for identification, calibration and quantification.

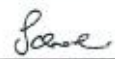
Component	Concentration ("as is")	Uncertainty
see product name	1.000 mg/ml ²	U = 0.004 mg/ml ³

Uncertainty of the concentration is expressed as an expanded uncertainty in accordance with ISO 17025 and Guide 34 at the about 95 % level of confidence using a coverage factor of $k = 2$ and has been calculated by statistical analysis of our production system and incorporates uncertainty of the purity, material density and balance and weighing technique.
Concentration based on material weightings and material purity factor (assay of the neat material).

The solution's concentration and homogeneity are verified by independent method.

LGC certifies that this standard meets the specification stated in this certificate and warrants this product to meet the stated acceptance criteria through the retail date when stored unopened as recommended. Product should be used shortly after opening to avoid concentration changes due to evaporation. Warranty does not apply to ampoules stored after opening.

Release Date:
Luckenwalde, June 2015

Signed: 
Dr. Sabine Schröder
Head of Reference Materials

¹ Ampoules are overfilled to ensure a minimum 1 ml volume fill. We advise laboratories to use measured volumes of this standard solution before diluting to the desired concentration.

² The value is based on the results of analytical techniques, which calibration and verification was carried out with standards traceable to SI-units. The value is expressed on an "as is" basis.
The concentration with its uncertainty is valid in the range between 19 °C and 25 °C.

The identity is verified by data from international scientific literature.
Gravimetrically prepared using qualified balances calibrated annually by accredited calibration services. Calibration verification performed daily prior to use utilizing weights traceable to SI via other mass standards.

³ The uncertainty "U" is the expanded uncertainty estimated in accordance with the Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement (GUM). It is corresponding to a level of confidence of about 95 %. Standard uncertainties are indicated with "u".

LGC Quality - ISO Guide 34:2009 ISO/IEC 17025:2005 ISO 9001:2008
DAKoS Q-MS-14176-01-05 DAUK D-PL-14176-01-05 DQS 12948 QMS

LGC GmbH, Im Biotechnologiepark, TGZ II, D-14943 Luckenwalde, Germany

© 2012 LGC limited. All rights reserved. LGC Standards is part of the LGC Group.
LoGiCal is a registered trademark of LGC Standards GmbH

5 pages

LGC Standards

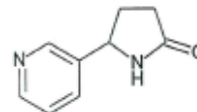
Excellence through measurement



Certificate of Analysis

Reference Standard

rac-Norcotinine



Molecular Formula: $C_9H_{10}N_2O$
Molecular Weight: 162.19
CAS Number: 17708-87-1

Catalogue Number: LGCFOR0517.14

Lot Number: 65309

Long-term Storage: -18 °C, dark

Appearance: off-white solid
hygroscopic

Melting Point (DSC): 115 °C

Assay 'as is': 99.9 %

Date of shipment: 2017-March-24

This certificate is valid for two years from the date of shipment provided the substance is stored under the recommended conditions unopened in the original container.

LGC Quality - ISO 9001:2008
DQS 12948 QMS

LGC GmbH, Im Biotechnologiepark, TGZ II, D-14943 Luckenwalde, Germany

© 2012 LGC limited. All rights reserved. LGC Standards is part of the LGC Group.
LoGiCal is a registered trademark of LGC Standards GmbH

LoGiCal®
produced by LGC

6 Pages

12. Требования к библиотеке

1. Наименование – «Библиотека масс-спектров сильнодействующих, наркотических и психоактивных веществ» (название дано условно, может быть изменено).
2. Предназначена – для достоверной идентификации конкретных сильнодействующих, наркотических и психоактивных (далее – сильнодействующих) веществ, востребованных в экспертно-криминалистических лабораториях наркотических и токсичных веществ, применяемых для обеспечения единства измерений в экспертно-криминалистической деятельности.
3. Функциональное назначение - информационное обеспечение сотрудников токсикологических, экспертно-криминалистических лабораторий об имеющихся масс-спектрах сильнодействующих веществ, которые они смогут применять для идентификации (а в случае наличия стандартного образца утвержденного типа – для количественного определения концентрации) определяемых субстанций;
 - предоставление информации сотрудникам ВНИИМС (головного исполнителя, отвечающего за метрологическую составляющую данной БД):
 - об источниках получения субстанции, применяемой для записи масс-спектра (наличие сертификата субстанции),
 - ФИО, звание, должность, стаж работы на масс-спектрометре, место работы оператора, вносящего масс-спектр в БД,
 - наименование прибора, на котором был записан масс-спектр,
 - условия записи спектра (режим ионизации, полярность, растворитель и т.п.),
 - дата записи масс-спектра ...
4. Требования к функциям, которые будет выполнять база данных
 - 4.1 Учет информации из п.3.
 - 4.2 Ввод, редактирование, просмотр информации.
 - 4.3 Поиск информации по форме масс-спектра, дате, названию субстанции, номеру CAS (если имеется на сопроводительных документах к субстанции), ФИО оператора, название прибора, на котором был записан масс-спектр и т.д. из п.3.
 - 4.4 Разграничение доступа к информации:
 - открытая часть БД – для всех без ограничений. Включает – дату записи масс-спектра, название субстанции, вид масс-спектра в виде картинки в pdf, например, условия записи масс-спектра, название прибора;
 - закрытая часть БД – только для авторизованных модераторов – доступна вся информация, включенная в БД, но без возможности вносить изменения в саму программу.
 - 4.5 Обмен информацией между всеми пользователями БД с целью обеспечения возможности для любого пользователя идентифицировать неизвестное соединение, масс-спектр которого он записал на своем приборе, путём обращения к данным из нашей БД. В которую возможно какой-то другой оператор уже записал масс-спектр именно этой субстанции.

Требования к библиотеке

4.6 Требования к организации входных данных

Таблица масс-спектров (зависимость интенсивности сигнала от отношения масс к заряду):

- в виде таблицы,
- в виде файла программы.

Таблица операторы - ФИО, звание, должность, стаж работы на масс-спектрометре, место работы оператора, вносящего масс-спектр в БД.

Таблица оборудование

Таблица сертификаты на субстанции – сертификат производителя с названием субстанции, каким-либо регистрационным номером, указанием чистоты субстанции, определенных примесей, датой производства – это, пожалуй, максимальный перечень информации о субстанции. Как минимум название, молекулярная формула, молекулярная масса. (Желательно, чтобы был указан регион происхождения проанализированной субстанции).

4.7 Требования к организации выходных данных – выходные данные должны отображаться на мониторе. Возможно, в виде спектра, основное условие – в виде таблицы – см. п 4.6.

Таблица масс-спектров (зависимость интенсивности сигнала от отношения масс к заряду):

- в виде таблицы,
- в виде файла программы,
- в виде картинки;

– масс-спектр с расширением, которое позволит его открыть в виде, совместимом с ПО других масс-спектрометров, чтобы полученный из нашей БД масс-спектр можно было загрузить в ПО прибора и сравнить с масс-спектрами, зашитыми в ПО прибора.

Таблица операторы – ФИО, звание, должность, стаж работы на масс-спектрометре, место работы оператора, вносящего масс-спектр в БД.

Таблица оборудование – наименование прибора, на котором был записан масс-спектр, условия записи спектра (режим ионизации, полярность, растворитель и т.д.).

4.7 Требования к информационной и программной совместимости. БД должна быть совместима с ПО приборов.

4.8 Требования к программным средствам – например Windows

5 Требования к защите информации - к редактированию масс-спектров и информации по ним допускаются только авторизованные модераторы, права определяет руководитель проекта.

6 Требования к интерфейсу – он должен быть понятен для пользователя.

7 Требования к наполнению БД – она должна быть легко пополняемой – каждый пользователь масс-спектрометра, выполняющий измерения на своем приборе, должен иметь возможность выкладывать полученные им масс-спектры в открытый свободный доступ. Форматы данных должны быть совместимыми.....

Требования к библиотеке

Созданная база данных позволяет выполнять все запланированные функциональные возможности, а также выполнять:

- визуализацию масс-спектров;
- поиск масс-спектров, удовлетворяющих заданным критериям;
- идентификацию масс-спектров неизвестных соединений на основе поиска в базе данных;
- генерацию отчетов о хранимой информации по запросу пользователя.

Планируется расширение функционала БД, при условии формирования новых научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ, а именно:

- БД должна будет обеспечивать возможность формирования поисковых запросов с использованием следующих критериев:
 - присутствие в масс-спектре одного или нескольких ионов с заданной массой;
 - соответствие массы анализируемого соединения массе соединения из базы данных;
 - присутствие в аннотации химического соединения из базы данных одного или нескольких ключевых терминов, заданных пользователем и др.
- БД должна будет храниться на сервере;
- визуализация масс-спектров и результатов их обработки должна будет выполняться на стороне клиента;
- увеличение производительности БД путем масштабирования;
- расширение функциональности системы;
- расширение возможностей работы с файлами в форматах различных производителей оборудования;
- добавление возможности хранения и обработки данных высокоэффективной жидкостной хроматографии и тандемной масс-спектрометрии (ГХ-МС).

Требования к данным, помещаемым в библиотеку

- Масс-спектры наркотических и токсичных веществ, должны быть получены хромато-масс-спектрометрическим методом с вводом пробы через жидкостный хроматограф.
- Масс-спектры должны быть записаны в условиях воспроизводимости или как минимум внутрिलाбораторной прецизионности.
- Достоверность полученных данных должна быть подтверждена.
- Должны иметься сертификаты анализируемых веществ.
- Измерения наркотических веществ должны проводиться в лабораториях/организациях, имеющих лицензию на анализ наркотиков I, II, III, IV списка.
- Каждый спектр должен сопровождаться необходимой для идентификации информацией – отношения массы к заряду, название анализируемого вещества, при наличии матрицы – название матрицы, название средства измерений, условия измерений.
- Отчет должен содержать идентификационные данные масс-спектрометра, детектора, на котором проводились измерения.
- Масс-спектры должны быть предварительно аттестованы в качестве стандартных справочных данных...
- Должны быть использованы стандартные образцы для помещения данных в библиотеку...

Масс-спектрометры

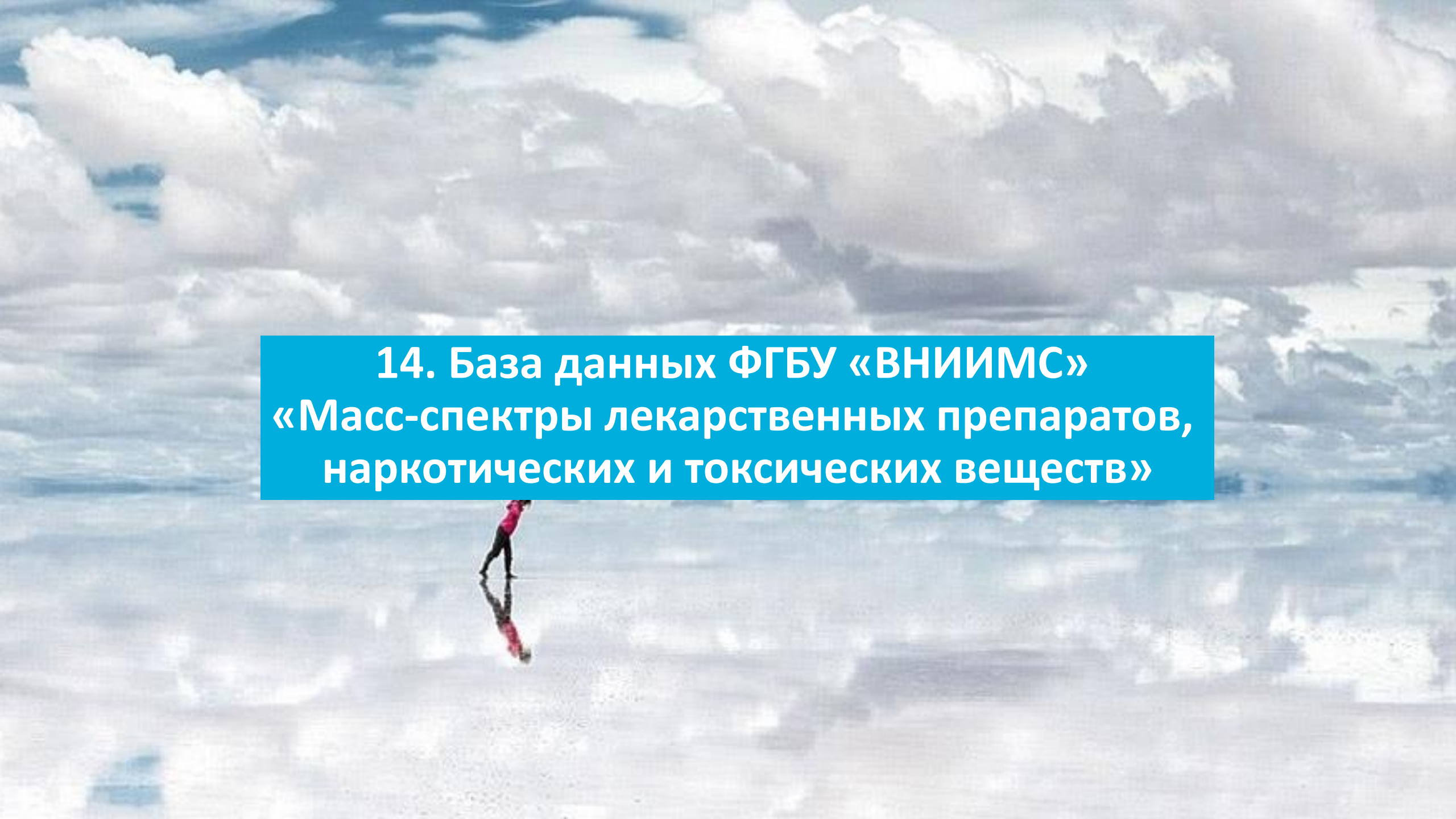


13. Бюджет неопределенности

	Факторы	Циталопрам		Флуоксетин		Десметилвенлафаксин		1-гидрокси-мидазолам		Карисопродол	
		Значение	Относительная стандартная неопределенность (%)	Значение	Относительная стандартная неопределенность (%)	Значение	Относительная стандартная неопределенность (%)	Значение	Относительная стандартная неопределенность (%)	Значение	Относительная стандартная неопределенность (%)
Неопределенность по типу А	Массы фрагментарных ионов (измерения проводились 5 раз)	325,1715	0,0002	310,1421	0,0005	264,1961	0,0002	342,0802	0,0003	97,1013	0,0001
		326,1748	0,0004	311,1446	0,0004	246,1851	0,0002	324,0695	0,0004	62,0237	0,0002
		327,1772	0,0003	148,1114	0,0004	215,1431	0,0003	344,0776	0,0005	158,1177	0,0004
		262,1026	0,0001	265,159	0,0002	121,0643	0,0005	343,0833	0,0003	176,1283	0,0002
		280,1126	0,0002	312,1467	0,0003	147,0799	0,0002	326,0667	0,0003	115,1118	0,0002
	Интенсивность ионного тока	999,23	0,0002	998,27	0,0001	999,08	0,0002	999,01	0,0002	998,23	0,0001
		173,78	0,0001	135,41	0,0001	388,52	0,0001	362,23	0,0002	896,25	0,0002
		19,21	0,0001	109,85	0,0002	27,28	0,0002	263,35	0,0002	317,89	0,0001
		6,02	0,0001	24,05	0,0001	6,09	0,0001	176,11	0,0002	227,02	0,0001
		5,27	0,0002	12,11	0,0002	2,27	0,0002	89,05	0,0002	226,84	0,0002

Бюджет неопределенности

Неопределенность по типу Б	Неопределенность от отклонения метода	0,00E+00	0,000001	0,00E+00	0,000001	0,00E+00	0,000001	0,00E+00	0,000001	0,00E+00	0,000001
	Неопределенность от чистоты анализа и реагентов	0.00E+00	0,000007	0.00E+00	0,000008	0.00E+00	0,00001	0.00E+00	0,000007	0.00E+00	0,000012
	Неопределенность, вносимая оператором	0.00E+00	0,000009	0.00E+00	0,000009	0.00E+00	0,00001	0.00E+00	0,000009	0.00E+00	0,00001
	Стандартная неопределенность (u)	0.00E+00	0,000513	0.00E+00	0,000521	0.00E+00	0,000538	0.00E+00	0,000529	0.00E+00	0,000538
	Расширенная неопределенность (U), k=2	0.00E+00	0,001026	0.00E+00	0,001042	0.00E+00	0,00108	0.00E+00	0,001058	0.00E+00	0,00108

A person wearing a red jacket and dark pants stands on a highly reflective surface, possibly a salt flat or a wet beach. The person's reflection is clearly visible on the surface below them. The background is a vast, bright sky filled with large, white, fluffy clouds. The overall scene is bright and airy.

**14. База данных ФГБУ «ВНИИМС»
«Масс-спектры лекарственных препаратов,
наркотических и токсических веществ»**



База данных масс-спектров ФГБУ "ВНИИМС"

База данных масс-спектров ФГБУ "ВНИИМС" - это ориентированное на метаданные хранилище с автоматическим управлением, предназначенное для эффективного хранения и запроса записей масс-спектров. Он призван служить основой для централизованной совместной базы данных масс-спектров метаболитов, метаданных и связанных с ними соединений.

Масс-спектр - это данные, полученные напрямую с оборудования и представляющие количество обнаруженных ионов с определенным отношением массы к заряду (m/z). Спектр отображается как график со значениями m/z по оси x и интенсивностью (имп/с) по оси y .

Поиск спектров

Просмотр спектров

Новости

Featured

Submitter High Scores

Please wait while we load the data for you...

11UT0011191.txt – Блокнот

Файл Правка Формат Вид Справка

Name: Phosphatidylethanolamine

InChIKey: NXIAGSLBMLLOYBM-ONGBHLIUSA-N

Precursor_type: [M-H]-

Spectrum_type: MS2

PrecursorMZ: 726.51

Instrument_type: LC-ESI-ITFT

Instrument: LC-10ADVPmicro HPLC, Shimadzu; LTQ Orbitrap, Thermo Scientific

Ion_mode: N

Collision_energy: 30%

Formula: C40H74NO8P

MW: 727

ExactMass: 727.5152049579999

Num Peaks: 8

Peak 1: 261.04 1.126940

Peak 2: 267.22 28.258558

Peak 3: 268.17 6.953009

Peak 4: 279.20 100.000000

Peak 5: 280.17 17.712099

Peak 6: 281.20 3.869870

Peak 7: 464.02 8.101212

Peak 8: 465.34 0.893047



Авторизация



Имя пользователя

Пароль

[Восстановить пароль?](#)

Отмена

Войти

Новости

15 м

Стат

Нов

Пр

Теги

15 м

Тест

Текс

П



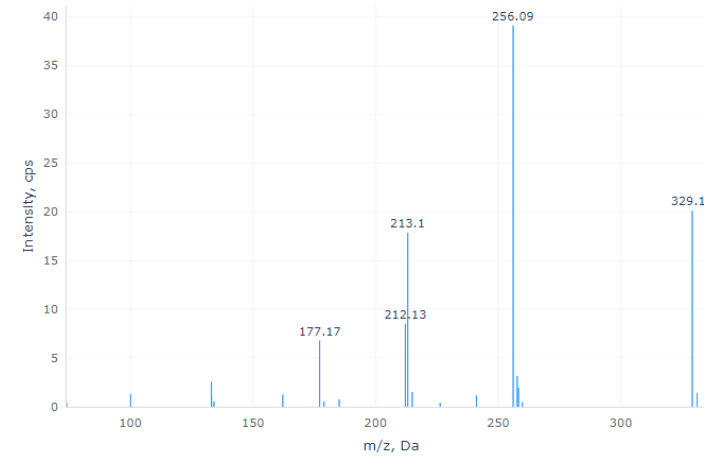
Отмена

Менеджер создания записи

Далее

Ниже представлен представленный вами масс-спектр.

Пожалуйста, убедитесь, что он выглядит так, как вы ожидаете



	Ион	Интенсивность
<input checked="" type="checkbox"/>	74,03	0,39
<input checked="" type="checkbox"/>	100,13	1,29
<input checked="" type="checkbox"/>	133,06	1,0
<input checked="" type="checkbox"/>	134,06	0,5
<input checked="" type="checkbox"/>	133,06	2,55

[Назад](#) **Менеджер создания записи** [Далее](#)

Эти сведения обеспечивают более полное представление о масс-спектре и позволяют пользователям легче находить важные спектры. Ниже приведен список **настоятельно рекомендуемых** к предоставлению сведений.

Введение источника / Тип хроматографии:

Выбрать один вариант

Тип / уровень MS:

Выбрать один вариант

Профиль пользователя



Имя:

Фамилия:

Адрес электронной почты:

Организация:

Должность:

Опыт работы:



Быстрый поиск

Поиск совпадений

Поиск по спектру

Отправьте масс-спектр для загрузки

Пожалуйста, выберите масс-спектр для поиска. Вы можете загрузить файл, из которого мы загружаем только первый спектр, или вставить масс-спектр в текстовом формате

Загрузка файла:

Выберите файл

Файл не выбран

Загрузка

Поддерживает файлы масс-спектральных данных в форматах .MSP и .txt

Вставить масс-спектр в виде текста:

Поддерживается загрузка в одну строку `[m/z]:[intensity] [m/z]:[intensity] ...` или многострочно:

`[m/z] [intensity]`

`[m/z] [intensity]`

...

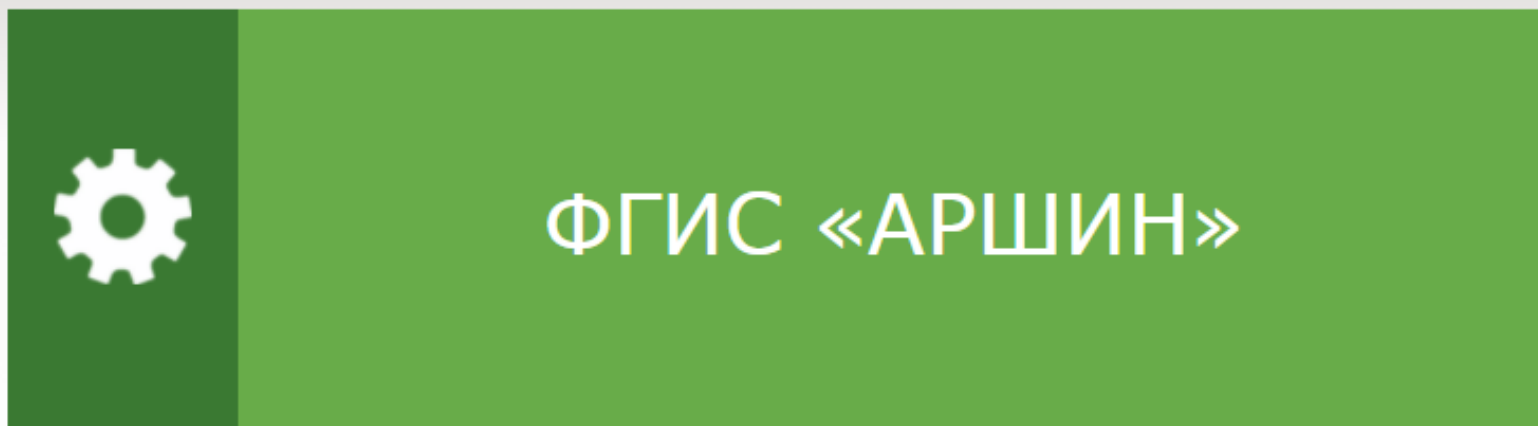
Загрузить спектр



РОССТАНДАРТ

Федеральный информационный фонд по обеспечению единства измерений

01 : 58 : 45 . мск



Создан во исполнение:

• Федерального закона
№102-ФЗ от 26 июня 2008 года
«Об обеспечении единства измерений»
(Статья 20)

[Свидетельство о регистрации](#)

[Порядок создания и ведения](#)

[Административный регламент по
представлению документов и сведений](#)

Федеральное агентство
по техническому регулированию
и метрологии



Всероссийский
научно-исследовательский
институт метрологической
службы



ГК «РОСАТОМ»
Обеспечение единства измерений
в области использования
атомной энергии



ИНФОРМАЦИЯ И ДАННЫЕ ГСССД

Данные по разделу

- Нормативные правовые акты Российской Федерации
- Нормативные документы <
- Информационные базы данных <
- Информация и данные ГСССД
- Международные документы
- Международные договоры
- Аттестованные методики (методы) измерений <
- Единый перечень измерений, относящихся к сфере государственного регулирования
- Эталоны единиц величин <
- Утвержденные типы стандартных образцов
- Утвержденные типы средств измерений
- Сведения о результатах поверки средств измерений
- Государственный информационный фонд

1 - 20 из 429 | 20 на страницу

Начало « 1 2 3 4 5 » Конеч

Номер таблиц ССД ↕	Наименование таблиц ССД ↕	Место хранения ↕	Состояние разработки ↕	Статус ↕	Действия
ГСССД 429-2023	Масс-спектры нейрометаболических стимуляторов. Пирацетам, фенибут	Главный научный метрологический центр "Стандартные справочные данные о физических константах и свойствах веществ и материалов" (ГНМЦ "ССД")	Приказ Росстандарта №711 от 03.04.2023	Действует	Просмотреть
ГСССД 428-2023	Масс-спектры лекарственных препаратов. Диклофенак, кеторолак, кетопрофен, метоклопрамид	Главный научный метрологический центр "Стандартные справочные данные о физических константах и свойствах веществ и материалов" (ГНМЦ "ССД")	Приказ Росстандарта №711 от 03.04.2023	Действует	Просмотреть
ГСССД 427-2023	Масс-спектры прекурсоров и сильнодействующих препаратов. Антралиловая кислота, вальпроевая кислота, эналаприл, циннаризин, пиперидин, налтрексон	Главный научный метрологический центр "Стандартные справочные данные о физических константах и свойствах веществ и материалов" (ГНМЦ "ССД")	Приказ Росстандарта №711 от 03.04.2023	Действует	Просмотреть
ГСССД 426-2023	Масс-спектры лекарственных препаратов, содержащих биологически-активные вещества, токсиканты. Дигоксин, лидокаин, селегилин, пентоксифиллин, кларитромицин, дилтиазем, флуфенамовая кислота, метотрексат, метилпарабен, нифедипин, нимесулид	Главный научный метрологический центр "Стандартные справочные данные о физических константах и свойствах веществ и материалов" (ГНМЦ "ССД")	Приказ Росстандарта №711 от 03.04.2023	Действует	Просмотреть
ГСССД 425-2023	Масс - спектры лекарственных препаратов, содержащих сильнодействующие вещества, требующие контроля. Тригексифенидил, ниметазепам, нандролон	Главный научный метрологический центр "Стандартные справочные данные о физических константах и свойствах веществ и материалов" (ГНМЦ "ССД")	Приказ Росстандарта №711 от 03.04.2023	Действует	Просмотреть
ГСССД 424-2023	Масс-спектры психостимуляторов. Мапротилин, мirtазапин, протриптилин	Главный научный метрологический центр "Стандартные справочные данные о физических константах и свойствах веществ и материалов" (ГНМЦ "ССД")	Приказ Росстандарта №711 от 03.04.2023	Действует	Просмотреть
ГСССД 423-2023	Масс-спектры наркотических средств. Носкапин, папаверин	Главный научный метрологический центр "Стандартные справочные данные о физических константах и свойствах веществ и материалов" (ГНМЦ "ССД")	Приказ Росстандарта №711 от 03.04.2023	Действует	Просмотреть
ГСССД 422-2023	Масс-спектры атипичных антипсихотиков. Тиоридазин, оланзапин	Главный научный метрологический центр "Стандартные справочные данные о физических константах и свойствах веществ и материалов" (ГНМЦ "ССД")	Приказ Росстандарта №711 от 03.04.2023	Действует	Просмотреть
ГСССД 421-2023	Масс-спектры нейролептиков (антипсихотики). Дроперидол, флуфеназин	Главный научный метрологический центр "Стандартные справочные данные о физических константах и свойствах веществ и материалов" (ГНМЦ "ССД")	Приказ Росстандарта №711 от 03.04.2023	Действует	Просмотреть

15. Потребители и партнеры

**Потребители
библиотеки масс-
спектров ГСССД**

Минздрав, КДЛ, ХТЛ, Бюро СМЭ, ГУНК МВД, НИИ, аналитики, токсикологи, Росздравнадзор, Фармацевтическая промышленность

Партнеры



ФГАОУ ВО
РНИМУ
им. Н.И.
Пирогова
Минздрав
а РФ



ФГБУ
«НИЦЭМ
им. Н.Ф.
Гамалеи»
Минздрав
а РФ



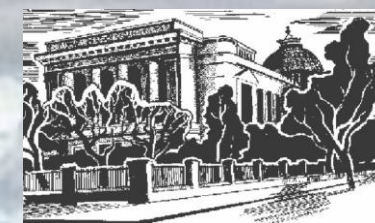
ФГАОУ ВО
«Первый МГУ
им. И.М.
Сеченова
Минздрава
России»



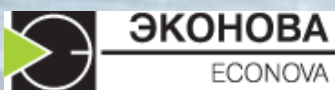
ФГБНУ
«Всероссийский
научно-
исследовательский
институт
рыбного хозяйства
и океанографии»



ФГБУ
"ФМИЦПН
им. В.П.
Сербского"
Минздрава
России»



ФГБНУ
«НИИНА им.
Г.Ф. Гаузе»



Институт
Хроматографии
ЭкоНова



КДЛ

ХТЛ



Комитет
Федерации
лабораторной
медицины



Ассоциация специалистов
по химико-
токсикологическому и
судебно-химическому
анализу



ФМБА России
Федеральное медико-биологическое агентство



NIM
(Китай)



KRIS
(Южная
Корея)



INMETRO
(Бразилия)



UME
(Турция)



INRIM
(Италия)

Авторы



Елена Кулябина



Федор Булыгин



Александр Козлов



Самвел Барсегян



Виктор Колобаев



Валерия Морозова



Татьяна Кулябина



Ольга Мелкова



Александр Кирилук

Благодарю за внимание!

