AIPSIN MS Database

Цель проекта

Сбор, обобщение и систематизация литературных данных о масс-спектрах дизайн-наркотиков и создание на их основе библиотеки масс-спектров в формате NIST и ChemStation.

Задачи проекта

Идентификация дизайн-наркотиков путём сравнения полученных масс-спектров (MS EI) с библиотекой **AIPSIN MS Database** с использованием стандартного программного обеспечения MSD ChemStation и/или NIST Mass Spectral Search Program.

Порядок помещения масс-спектров в AIPSIN MS Database

1. Табличные масс-спектры

Ряд литературных источников содержит информацию о масс-спектрах дизайн-наркотиков в табличном виде. Например:

YAKUGAKU ZASSHI 128(10) 1499—1505 (2008) © 2008 The Pharmaceutical Society of Japan

—Articles—

2006 年度買い上げ違法ドラッグ製品から検出されたデザイナードラッグ成分の NMR を中心とした分析

内山奈穂子,* 花尻(木倉)瑠理, 川原信夫, 合田幸広

Analysis of Designer Drugs Detected in the Products Purchased in Fiscal Year 2006

Nahoko UCHIYAMA,* Ruri KIKURA-HANAJIRI, Nobuo KAWAHARA, and Yukihiro GODA
National Institute of Health Sciences (NIHS), 1–18–1 Kamiyoga, Setagaya-ku, Tokyo 158–8501, Japan

(Receiv

Many psychotropic sub
ing more serious problem.
Pharmaceutical Affairs La
mines, 2 piperazines, 6 alk
decreased through this regu
15 products, which purcha
methylone derivertives (1-(
methylenedioxyphenyl) but
MDEA, a MDMA derivati
phetamine derivative (*N*-
methoxy-*N*-ethyl-*N*-isoprop
identified in this study.

Table 4. Analytical Data of 7 Compounds Obtained from GC-MS and LC-MS Analyses

Compounds	GC-MS		LC-MS	
	Retention time (min)	Fragmentations of GC-MS Mass spectra[a)]	Retention time (min)	$[M+H]^+$
MDPV	33.49	126(100), 127(9), 149(4), 55(3), 65(3), 96(3), 97(3) (275 $[M^+]$ (<0.1)	28.0	276
bk-MBDB	22.23	72(100), 57(6), 149(5), 73(5), 65(5), 121(4), 70(4), 63(4), 42(4), (219 $[M^+-2]$ (0.1))	10.8	222
bk-MDEA	21.96	72(100), 44(18), 70(8), 42(7), 149(7), 65(6), 73(5), 63(5), 121(5), (219 $[M^+-2]$ (0.5))	8.1	222
N-OH MDMA	—	Degradation	18.1	210
N-Me-4-FMP	8.97	58(100),109(13), 56(5), 83(5), 59(4), 42(3), 57(3), 152(3) (167 $[M^+]$ (<0.1))	10.5	168
Indan-2-amine	9.42	133 $[M^+]$ (100), 116(57), 91(53), 132(38), 115(33), 118 (27), 117(23)	4.6	134
5-MeO-EIPT	37.21	100(100), 58(25), 101(7), 160(5), 174(3), 145(3), 117(3), 260 $[M^+]$ (2)	24.7	261

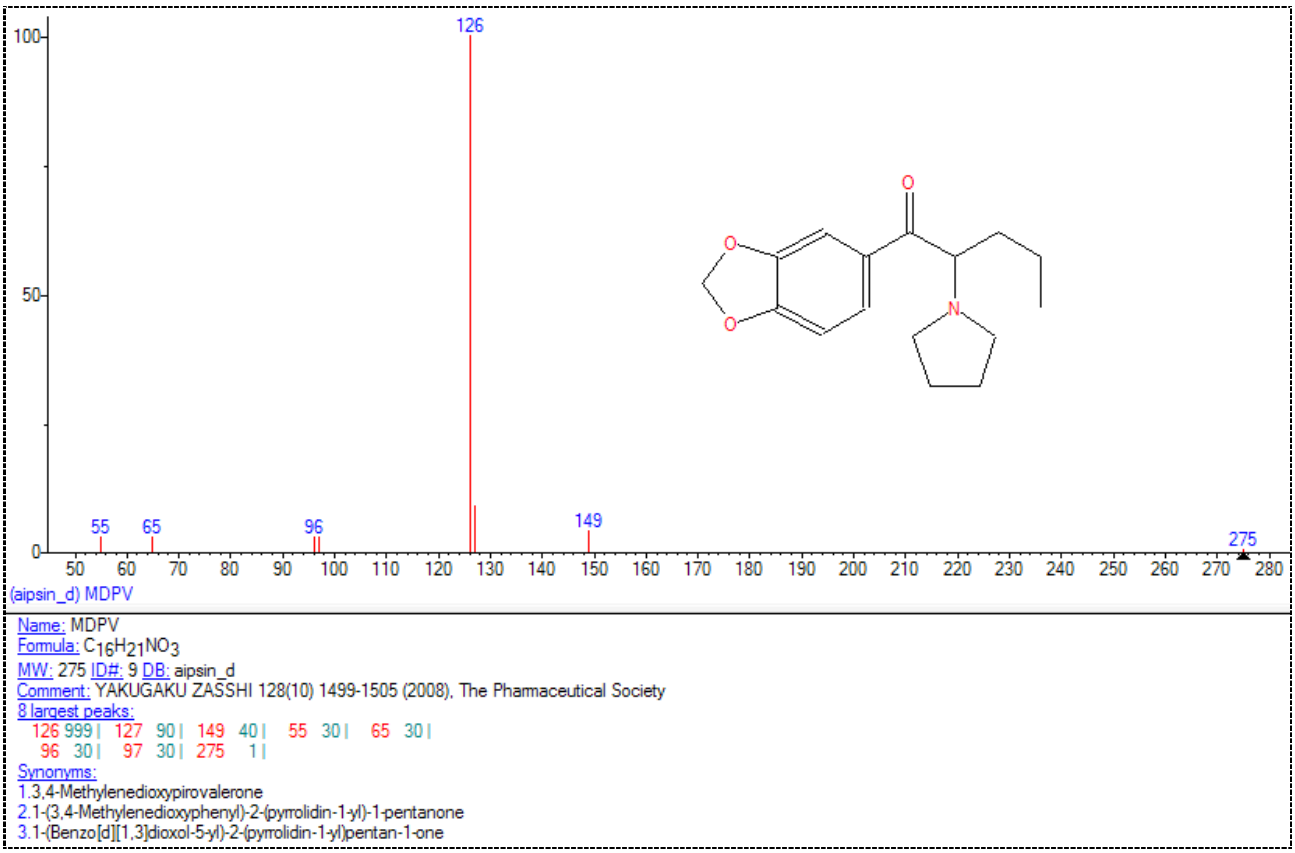
a) Each value in parenthesis shows the ratio of abundance of the fragment ion to that of the base peak ion (=100).

В связи с большим объёмом информации идентификация веществ с использованием табличных данных является весьма трудоёмким и времязатратным процессом, в котором также немаловажную роль играет и уровень профессиональной подготовки специалистов, проводящих GC/MS-анализ. Очевидно, что ускорение процедуры идентификации по табличным спектрам возможно только после их конвертации в наиболее распространённые в настоящее время форматы NIST и ChemStation, что и является основной целью создания **AIPSIN MS Database**.

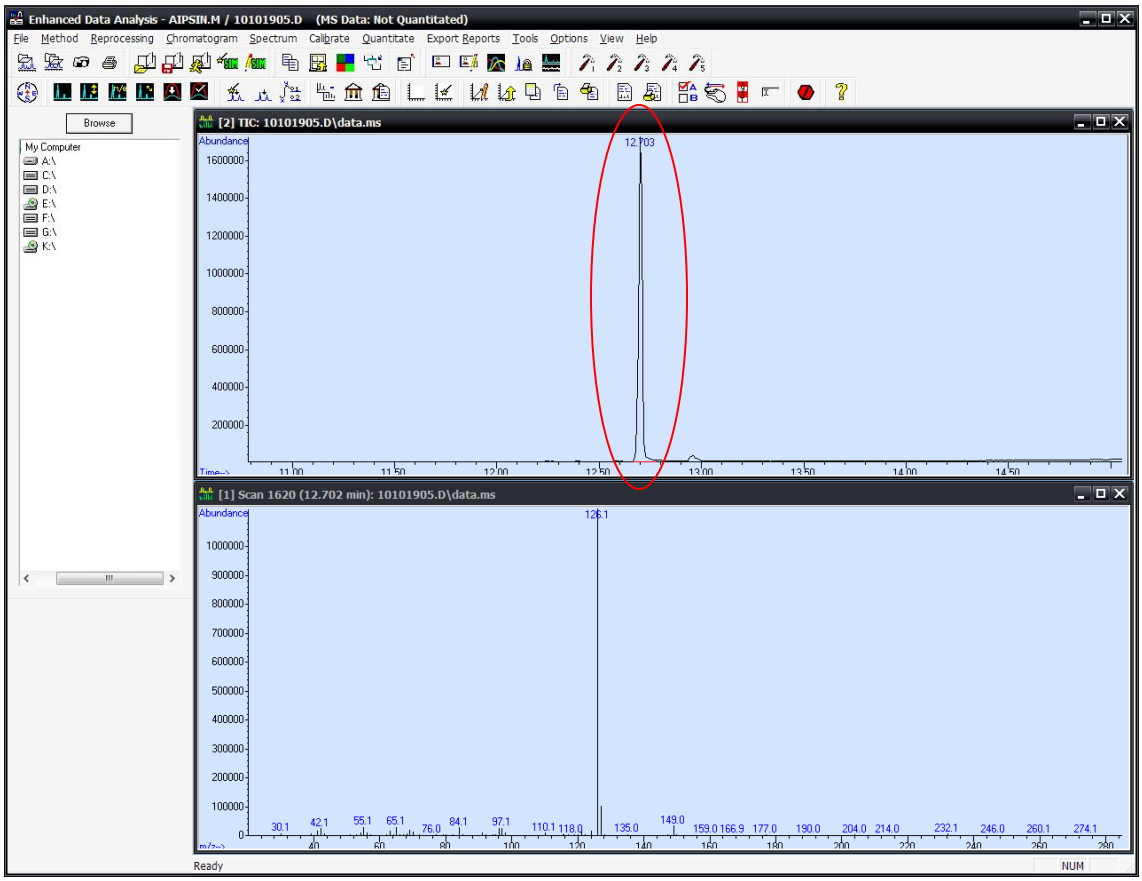
Следует отметить, что одновременно с помещением в **AIPSIN MS Database** конвертированного масс-спектра к нему добавляется следующая информация:

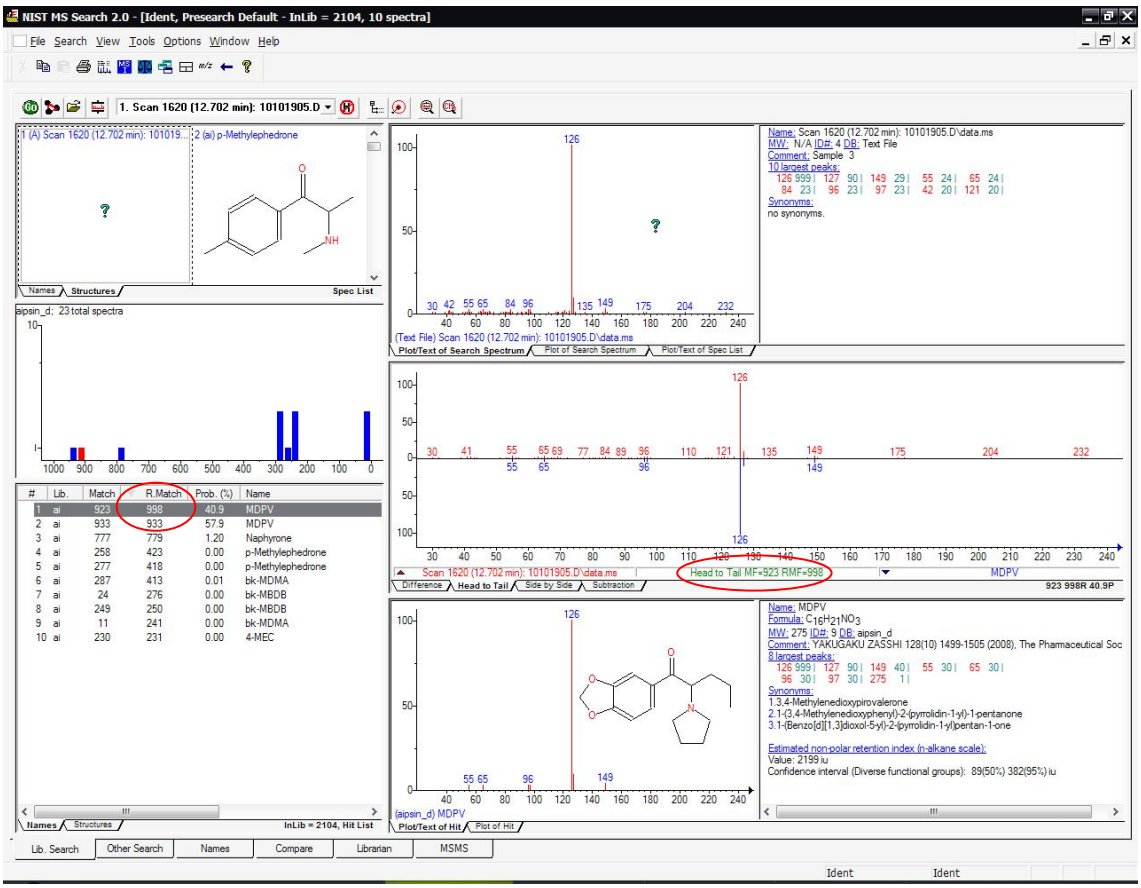
1) химическое название;
2) брутто-формула;
3) значение молекулярной массы;
4) CAS-номер (при наличии);
5) ссылка на первоисточник;
6) синонимы;
7) структурная формула.

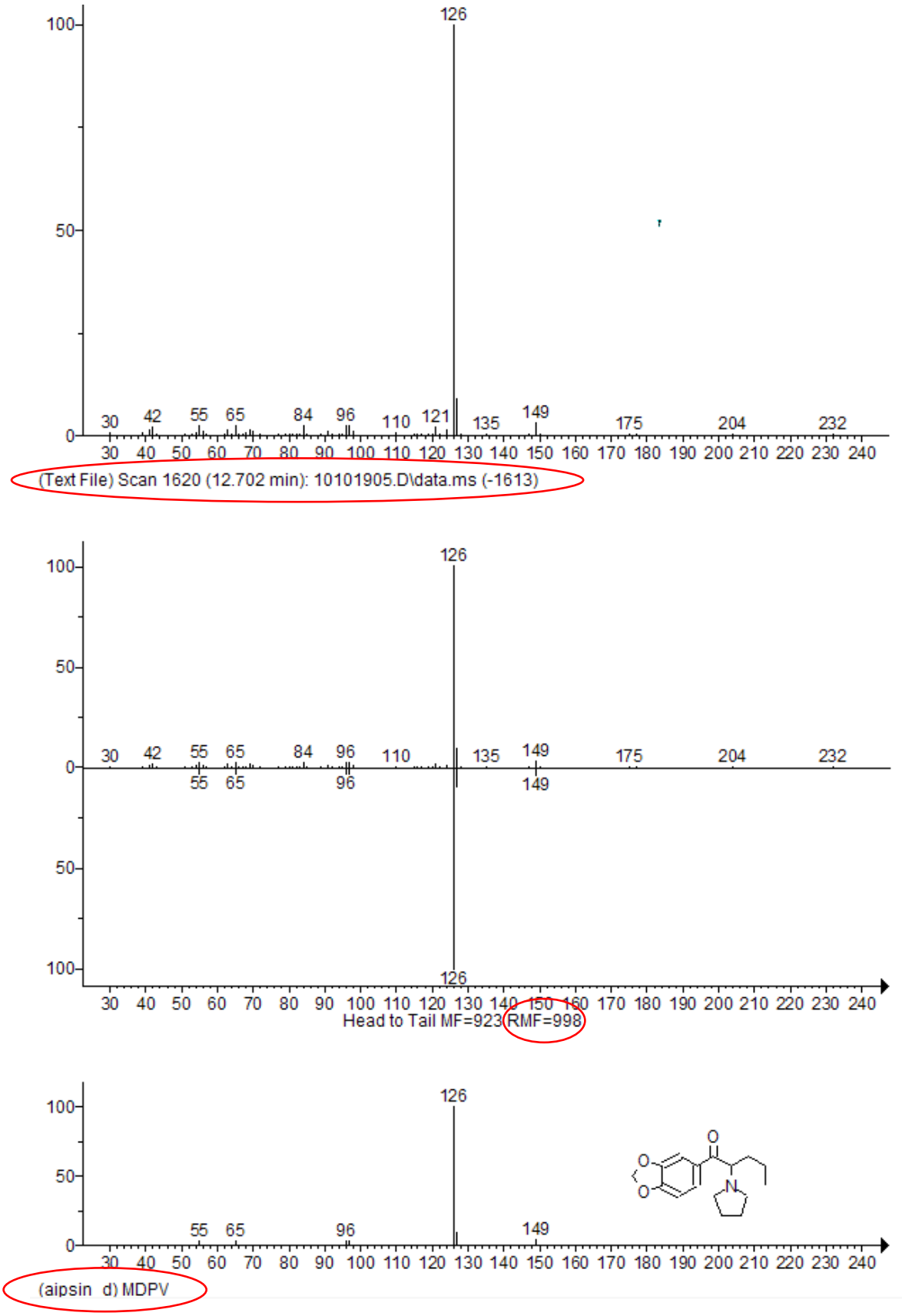
Например:



Ниже приведён пример идентификации вещества по конвертированному *табличному* масс-спектру:


Enhanced Data Analysis - AIPSIN.M / 10101905.D (MS Data: Not Quantitated)
File Method Reprocessing Chromatogram Spectrum Calibrate Quantitate Export Reports Tools Options View Help
Browse
My Computer
A:\
C:\
D:\
E:\
F:\
G:\
K:\
[2] TIC: 10101905.D\data.ms
Abundance
12.703
[1] Scan 1620 (12.702 min): 10101905.D\data.ms
126.1
Ready
NUM


NIST MS Search 2.0 - [Ident, Presearch Default - InLib = 2104, 10 spectra]
File Search View Tools Options Window Help
1. Scan 1620 (12.702 min): 10101905.D
1 (A) Scan 1620 (12.702 min): 101019...
2 (ai) p-Methylephedrone
aipsin_d: 23 total spectra
Lib. Match R.Match Prob. (%) Name
1 ai 923 998 40.9 MDPV
2 ai 933 933 57.9 MDPV
3 ai 777 779 1.20 Naphyrone
4 ai 258 423 0.00 p-Methylephedrone
5 ai 277 418 0.00 p-Methylephedrone
6 ai 287 413 0.01 bk-MDMA
7 ai 24 276 0.00 bk-MBDB
8 ai 249 250 0.00 bk-MBDB
9 ai 11 241 0.00 bk-MDMA
10 ai 230 231 0.00 4-MEC
Name: Scan 1620 (12.702 min): 10101905.D\data.ms
MW: N/A ID#: 4 DB: Text File
Comment: Sample 3
10 largest peaks:
126 999 | 127 90 | 149 29 | 55 24 | 65 24 |
84 23 | 96 23 | 97 23 | 42 20 | 121 20 |
Synonyms:
no synonyms.
Head to Tail MF=923 RMF=998
Name: MDPV
Formula: C16H21NO3
MW: 275 ID#: 9 DB: aipsin_d
Comment: YAKUGAKU ZASSHI 128(10) 1499-1505 (2008), The Pharmaceutical Soc
8 largest peaks:
126 999 | 127 90 | 149 40 | 55 30 | 65 30 |
96 30 | 97 30 | 275 1 |
Synonyms:
1.3,4-Methylenedioxypirovalerone
2.1-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-2-(pyrrolidin-1-yl)-1-pentanone
3.1-(Benzo[d][1,3]dioxol-5-yl)-2-(pyrrolidin-1-yl)pentan-1-one
Estimated non-polar retention index (n-alkane scale):
Value: 2199 iu
Confidence interval (Diverse functional groups): 89(50%) 382(95%) iu
Lib. Search
Other Search
Names
Compare
Librarian
MSMS
Ident
Ident



При идентификации вещества по конвертированному табличному масс-спектру результаты библиотечного поиска *целесообразно* предварительно отсортировать по R.Math-фактору, так как в данном случае именно его значение играет определяющую роль.

2. Графические масс-спектры

Во многих литературных источниках масс-спектры дизайн-наркотиков представлены в графическом виде. *В ряде случаев* их конвертация в формат NIST и ChemStation также возможна. Например:

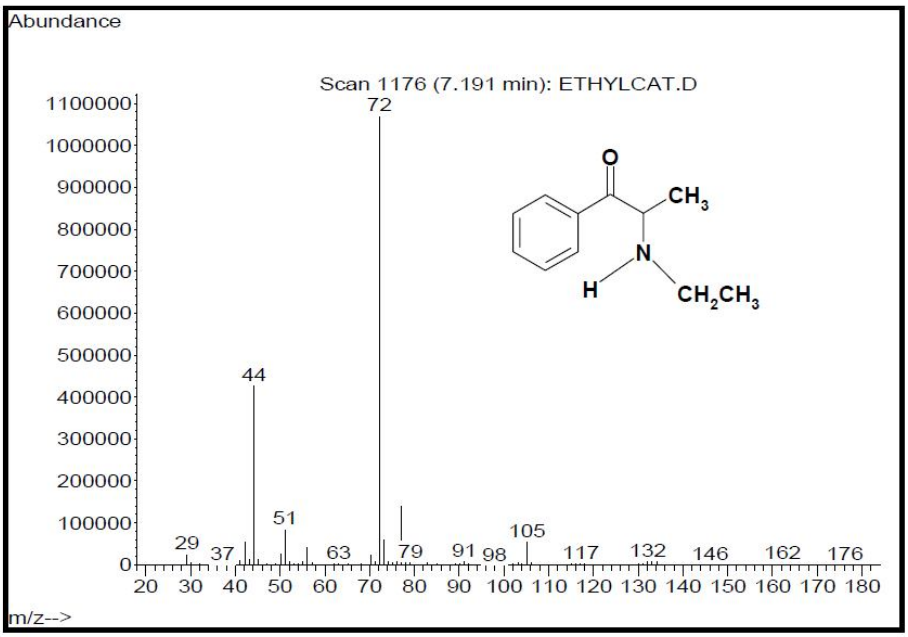
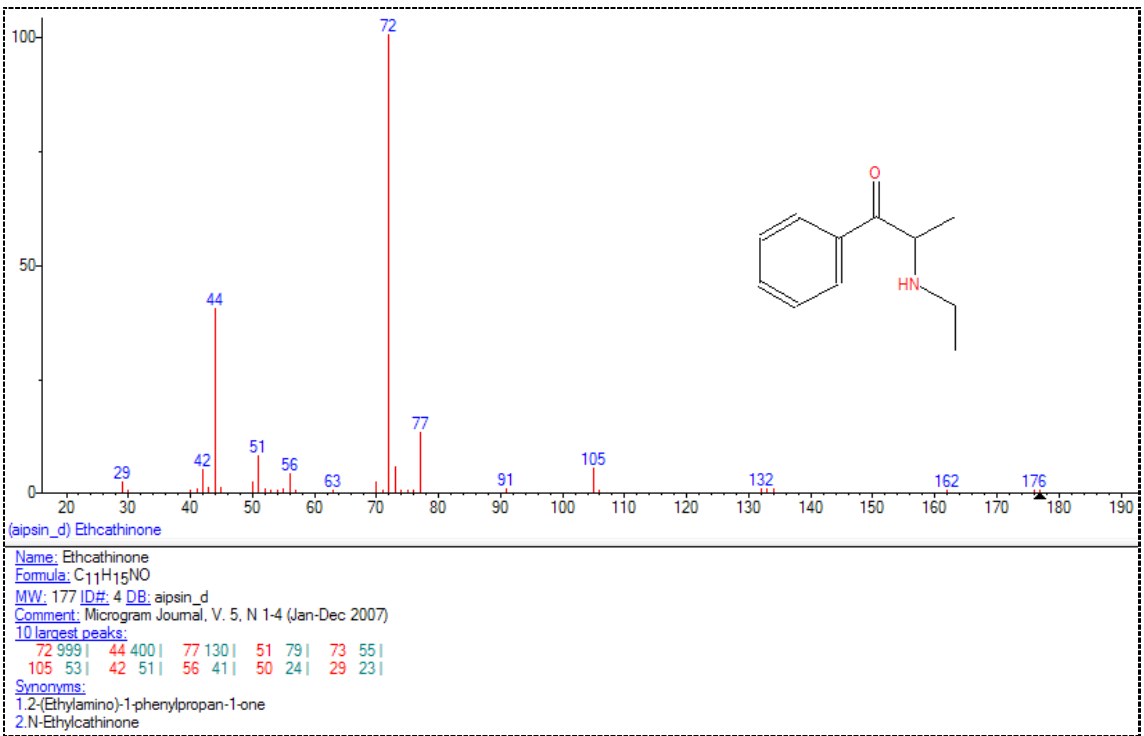


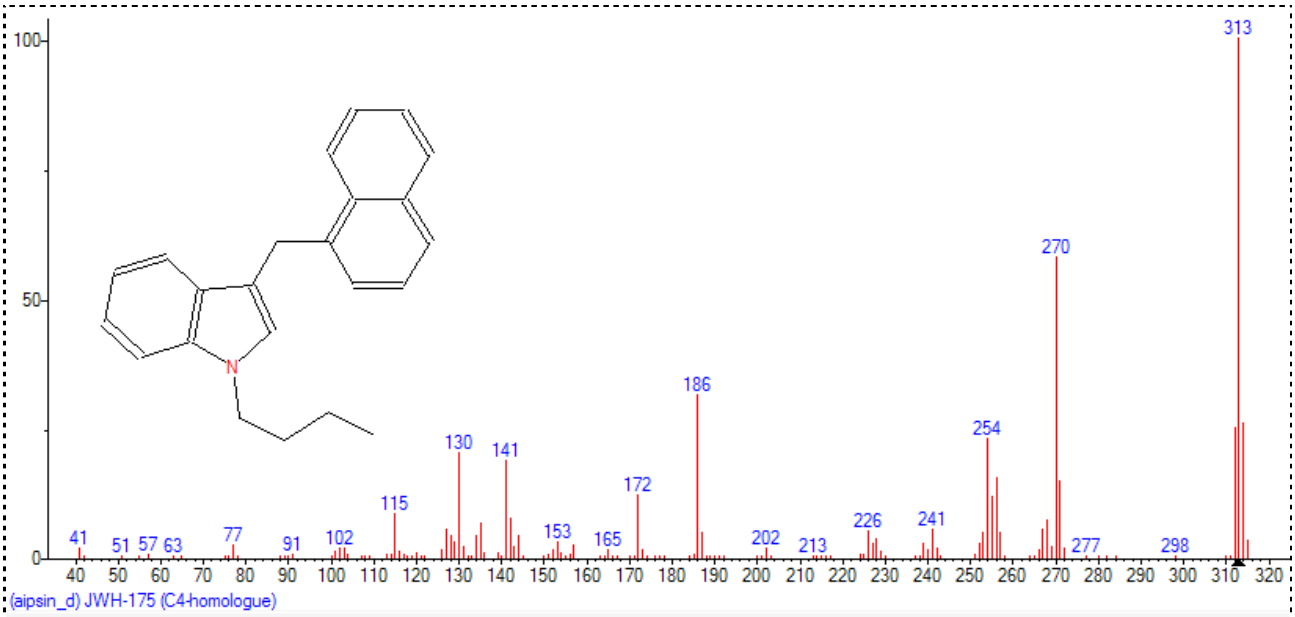
Figure 1b. Mass Spectrum of Ethylcathinone.



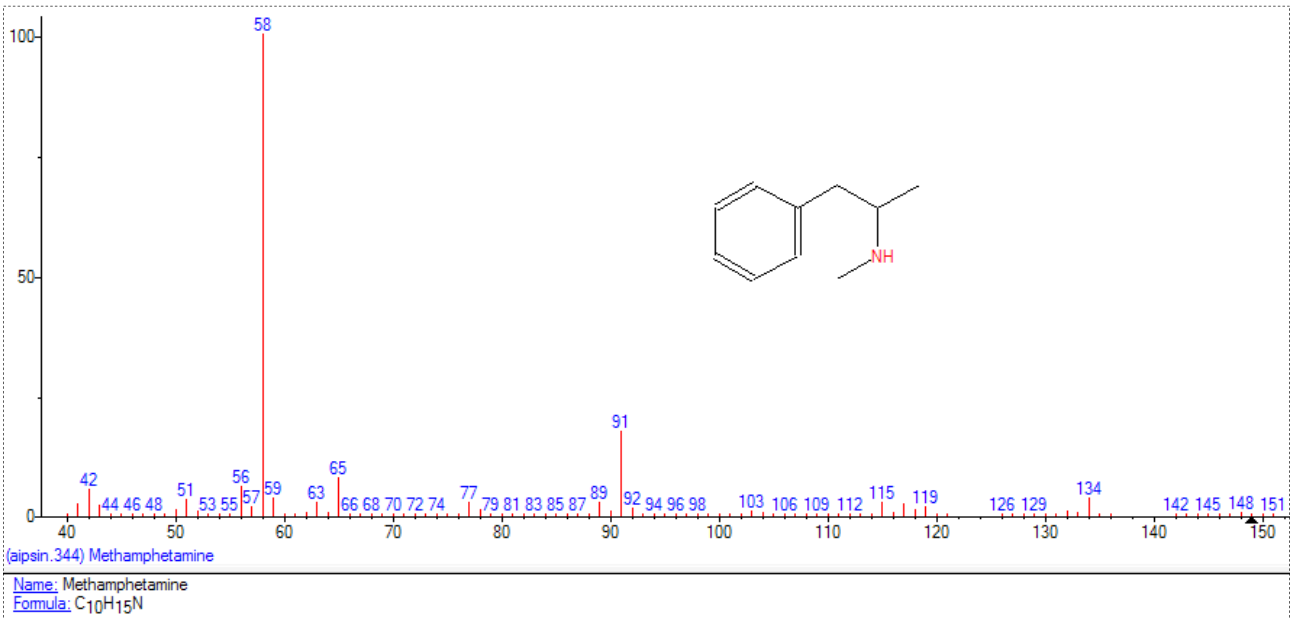
3. Реальные масс-спектры

В **AIPSIN MS Database** помещаются и реальные масс-спектры дизайн-наркотиков. В первую очередь, это касается масс-спектров, прошедших процедуру идентификации по конвертированным *табличным* и *графическим* масс-спектрам, уже включённым в библиотеку.

Кроме того, в **AIPSIN MS Database** могут быть включены и масс-спектры, полученные из авторитетных источников, например:



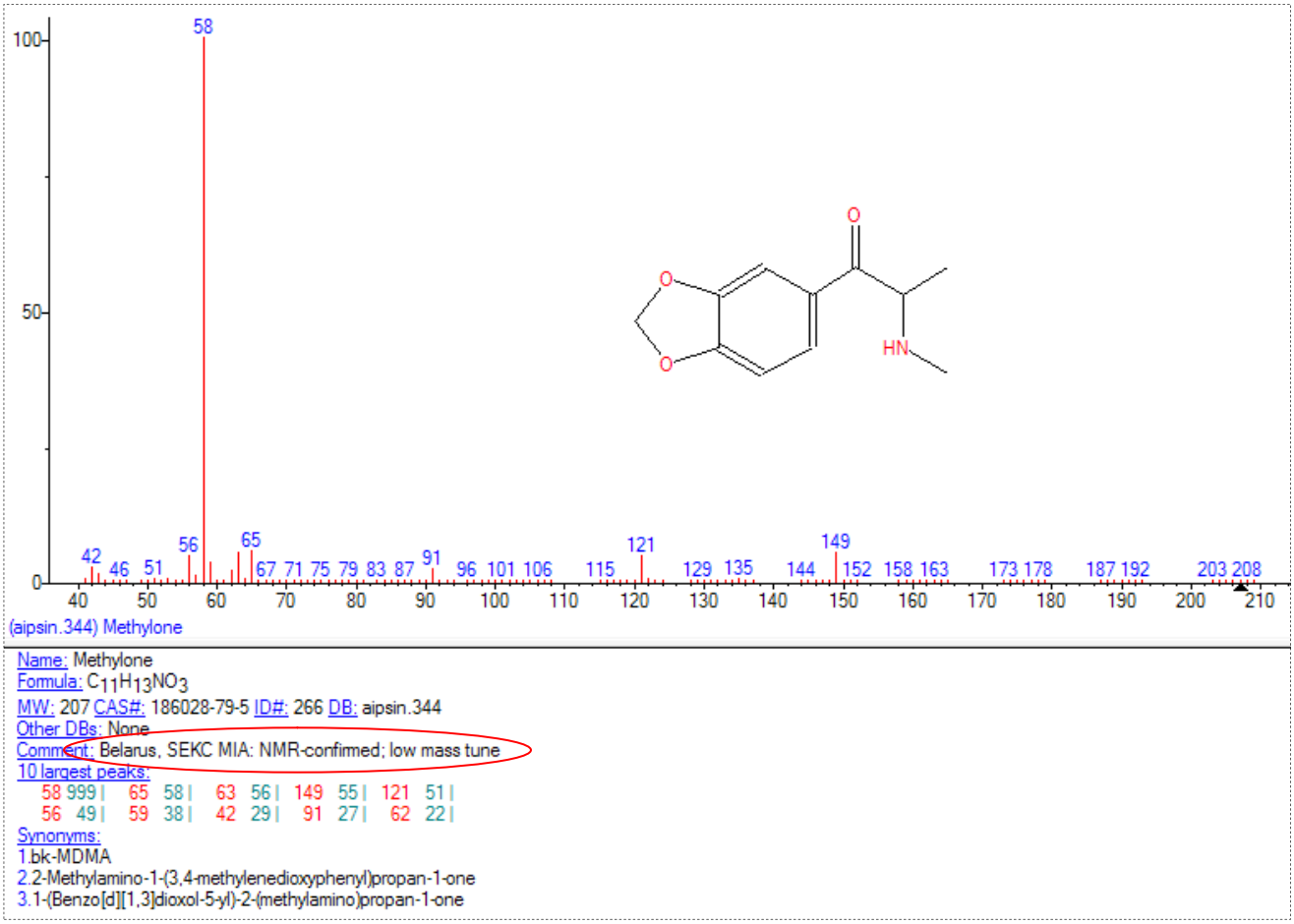
Name: JWH-175 (C4-homologue)
Formula: $C_{23}H_{23}N$
MW: 313 ID#: 15 DB: aipsin_d
Comment: RI(ZB5MS) 2841, Contributor: TU Braunschweig, Inst f Pharm Biol, T Beuerle
10 largest peaks:
313 999 | 270 578 | 186 313 | 314 259 | 312 250 |
254 230 | 130 202 | 141 188 | 256 155 | 271 150 |
Synonyms:
1.3-(Naphthalen-1-ylmethyl)-1-butyl-1H-indole
2.1-Butyl-1H-indol-3-yl-(1-naphthyl)methane



Name: Methamphetamine
Formula: $C_{10}H_{15}N$
MW: 149 CAS#: 537-46-2 ID#: 345 DB: aipsin.344
Other DBs: None
Comment: Belarus, SEKC MIA: Methamphetamine-standard
10 largest peaks:
58 999 | 91 176 | 65 80 | 56 61 | 42 56 |
59 37 | 134 37 | 51 35 | 115 30 | 63 29 |
Synonyms:
1.Methyl-(1-methyl-2-phenyl-ethyl)amine
2.N-Methyl-1-phenyl-propan-2-amine
3.N-Methyl-1-phenylpropan-2-amine
4.N-methyl-1-phenyl-2-propanamine

Подобного рода спектры могут служить ориентиром для специалистов, задачей которых является идентификация дизайн-наркотиков.

Реальные масс-спектры веществ, структура которых предварительно была подтверждена методом ЯМР, дополняются соответствующим комментарием:



AIPSIN MS Database постоянно дополняется конвертированными табличными и графическими масс-спектрами (по мере выявления литературных источников), а также реальными масс-спектрами, прошедшими процедуру идентификации.

AIPSIN MS Database не является отдельно поставляемым коммерческим продуктом, а позиционируется как один из модулей информационно-поисковой системы **AIPSIN Drugs (АИПСИН Антинаркотики)**.

Подробную информацию о продуктах семейства **AIPSIN®** можно получить на официальном сайте **http://aipsin.com/.**

По состоянию на 27.12.2010 в AIPSIN MS Database включено 468 масс-спектров 283 веществ:

(+/-)-3-(4-tert-Butylphenyl)cyclohexanone
(+/-)-3-Ethoxy-6-(2-propenyl)-2-cyclohexen-1-one
(+/-)-4-(2-Propenyl)-2-cyclohexen-1-one
(1R*,3R*,4S*)-3-(4-tert-Butylphenyl)-4-(2-propenyl)cyclohexanol
(3R*,4S*)-3-(4-tert-Butylphenyl)-4-(2-propenyl)cyclohexanone
1-(4-Fluorophenyl)butan-2-amine
2-(2,3-Methylenedioxyphenyl)-1,1-dimethylethanamine
2-(2,3-Methylenedioxyphenyl)-1-ethylethanamine
2-(2,3-Methylenedioxyphenyl)-N,N-dimethylethanamine
2-(2,3-Methylenedioxyphenyl)-N-ethylethanamine
2-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-1,1-dimethylethanamine
2-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-N,N-dimethylethanamine
2-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-N-ethylethanamine
2,3-MDMA
2-Aminoindan
2C-B
2C-C
2C-C-3
2C-E
2C-I
2C-T-2
2C-T-2-OH
2C-T-4
2C-T-7
2-FA
2-FMC
2-MeO-3-MMA
2-MeO-4-MMA
2-MeO-5-MMA
2-MeO-6-MMA
2-Methoxymethcathinone
2-Methylbutylnitrite
2-Methyl-N-pentylindole
2-Methyl-N-propylindole
3-(4-tert-Butylphenyl)cyclohex-2-en-1-one
3,4-MD-MeNS
3CPP
3-FA
3-Fluoro-4-methoxyamphetamine
3-Fluoro-iso-methcathinone
3-FMC
3-MeO-2-MMA
3-MeO-4-MMA
3-MeO-5-MMA
3-Methoxymethcathinone
3-Naphthoylindole
3TMP
4-AcO-DIPT
4-Butyl-1-naphthoic acid
4CPP
4-FA
4-FMA
4-FMC
4-FMP-NOH
4-MEC
4-MeO-2-MMA
4-MeO-3-MMA
4-MeO-MABP
4-MeO-MeNS
4-MeS-MeNS
4MPP
4-OH-DIPT
4-Propyl-1-naphthoic acid
5-APDB
5-Fluoro-2-methoxyamphetamine
5-MeO-2-MMA
5-MeO-AMT
5-MeO-DALT
5-MeO-DET
5-MeO-DIPT
5-MeO-DMT
5-MeO-DPT
5-MeO-EIPT
5-MeO-MIPT
6-APDB
6-Methoxy-1-naphthoic acid
7-Methoxy-1-naphthoic acid
ALEPH-2
AM-694
Amphetamine
Aprophene
BAY 59-3074
BDB
Butylone
Butylone ME
BZP
CB-25
CB-52
CP 47,497-C7
CP 47,497-C8 (E, trans, minor isomer)
CP 47,497-C8 (Z, cis, major isomer)
CP 55,940
D2PM
DEA
Desoxypipradol
Dimethcathinone
DIPT
DOB
DOC
DOI

DON
DPT
Ethcathinone
Ethylone
FLEA
Glaucine
HMDMA
HU-210
HU-211
HU-331
JWH-015
JWH-018
JWH-019
JWH-020
JWH-072
JWH-073
JWH-076
JWH-081
JWH-098
JWH-116
JWH-122
JWH-133
JWH-148
JWH-149
JWH-151
JWH-159
JWH-160
JWH-164
JWH-165
JWH-166
JWH-175
JWH-175 (C3)
JWH-175 (C4)
JWH-175 (C6)
JWH-175 (C7)
JWH-176
JWH-180
JWH-181
JWH-182
JWH-184
JWH-185
JWH-189
JWH-192
JWH-193
JWH-194
JWH-195
JWH-196
JWH-197
JWH-198
JWH-199
JWH-200
JWH-203
JWH-210
JWH-211
JWH-212
JWH-213
JWH-231
JWH-232
JWH-234
JWH-235
JWH-236
JWH-239
JWH-240
JWH-241
JWH-242
JWH-250
JWH-251
JWH-262
JWH-266
JWH-267
JWH-268
JWH-294
JWH-295
JWH-296
JWH-297
JWH-323
JWH-324
JWH-325
JWH-337
JWH-342
JWH-343
JWH-344
JWH-345
JWH-384
JWH-385
JWH-386
JWH-387
JWH-392
JWH-394
JWH-395
JWH-396
JWH-397
JWH-398
JWH-399
JWH-400
JWH-401
JWH-402
JWH-403
JWH-404
JWH-406

JWH-407
JWH-408
JWH-409
JWH-410
JWH-411
JWH-412
JWH-413
JWH-414
JWH-415
JWH-416
JWH-417
JWH-418
JWH-419
JWH-420
JWH-421
JWH-422
JWH-423
JWH-424
JWH-425
JWH-428
JWH-429
L-759, 633
MBDB
MBZP
MDAI
MDBP
MDBZC
MDMA
MDPBP
MDPPP
MDPV
Mephedrone
Mephedrone ME
Methamphetamine
Methedrone
Methylone
Methylone ET
MIPT
MMDA-2
MPBP
MPHP
MPPP
N-(Cyclopropylmethyl)butylone
N-(Cyclopropylmethyl)mephedrone
N-(Cyclopropylmethyl)methylone
N,N-Diphenyl-4-ethyl-1-naphthalenecarboxamide
N-Acetylethcathinone
N-Allylbutylone
N-Allylmephedrone
N-Allylmethylone
Naphyrone
N-Butylindole
N-Ethyl-4-fluoroamphetamine
N-Heptylindole
N-Hexylindole
N-Pentylindole
N-Propylindole
PEA
p-Methylamphetamine
PMMA
PPP
Pravadoline
RCS-4
Salvinorin A
TFMPP
TMA
TMA-2
TMA-6
VJS-066
VJS-070
VJS-083
VJS-084
VJS-248
VJS-251
VJS-301
VJS-410
VJS-442
VJS-454
VJS-536
VJS-539
WIN 55212-2
α-Phthalimidopropiophenone
PVP