

Состав пакета библиотек масс-спектров

SUDMED_NNCN_20141108

к информационным письмам ФГБУ ННЦ НАРКОЛОГИИ
«ИДЕНТИФИКАЦИЯ НАРКОТИЧЕСКИХ И ПСИХОАКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ В БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ И ВОЛОСАХ
МЕТОДОМ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ С МАСС-СЕЛЕКТИВНЫМ ДЕТЕКТИРОВАНИЕМ»,
«ОБНАРУЖЕНИЯ МЕТАБОЛИТОВ СИНТЕТИЧЕСКИХ КАННАБИМИМЕТИКОВ В МОЧЕ ВОЛОСАХ И СЫВОРОТКЕ КРОВИ
МЕТОДОМ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ С МАСС-СЕЛЕКТИВНЫМ ДЕТЕКТИРОВАНИЕМ»,
«ОБНАРУЖЕНИЕ СИНТЕТИЧЕСКИХ КАННАБИМИМЕТИКОВ, НАРКОТИЧЕСКИХ, ПСИХОАКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ И ИХ
МЕТАБОЛИТОВ В МОЧЕ, ВОЛОСАХ И НОГТЯХ МЕТОДАМИ ЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ С МАСС-
СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИМ ДЕТЕКТИРОВАНИЕМ»

адрес постоянного размещения пакета <http://www.sudmed.ru/index.php?showtopic=6924>

1. Сводная библиотека масс-спектров SUDMED_1465:

- SUDMED_1465_NISTLIB_20141026 - библиотека в формате NIST Search
- SUDMED_1465_AMDISLIB_20141026 - библиотека в формате AMDIS
- SUDMED_1465_ACSLIB_20141026 - библиотека в формате хемстанции (Agilent ChemStation)
- SUDMED_1465_20141026_list.pdf - список содержимого библиотеки

Сводная библиотека включает 1465 спектров метаболитов преимущественно в виде триметилсилильных и метильных дериватов, включает многие рабочие структуры и линейные индексы удерживания.

В сводную библиотеку вошли спектры опубликованные для свободного использования в открытых источниках, в том числе в библиотеках CAYMANSPECTRALLIBRARY, SWGDRUG, rf-des_drug, pub_cann, на интернет ресурсе sudmed.ru, в научных публикациях.

2. SUDMED_LC-MS-MS.CDB - база данных масс-спектров соударений высокого разрешения в формате ПО MassHunter, включающая информацию о веществах и их структурах. Библиотека включает спектры метаболитов, нативных веществ "дизайнерских наркотиков" наиболее часто встречающихся в практике химико-токсикологической лаборатории. В библиотеку вошли спектры опубликованные, в научных публикациях, а также спектры проверенные с помощью базы данных Broecker, Herre, and Pragst master forensic and toxicology accurate mass compound database with accurate mass MS/MS spectra.

3. PUB_SAV50_SUDMED_464_AMDISLIB_20141027 - библиотека включает 464 спектра наркотических и психоактивных веществ и их метаболитов в формате AMDIS с фиксированными временами удерживания (RTL) для колонок HP-5ms и VF-5ms (Agilent, 30 м × 0.25 мм × 0.25 мкм) соответственно к информационным письмам ННЦН. В библиотеку включены только практически значимые аналиты;

4. PUB_SAV_TMSR4_SUDMED_156_AMDISLIB_20141027 - библиотека включает 156 спектров ТМС-производных наркотических и психоактивных веществ и ТМС-производных их метаболитов в формате AMDIS с фиксированными временами удерживания (RTL) для колонок HP-5ms и VF-5ms (Agilent, 30 м × 0.25 мм × 0.25 мкм) соответственно к информационным письмам ННЦН. В библиотеку включены только практически значимые аналиты;;

5. PUB_PB_FUB_CHM_ALL_V8_SUDMED_114_AMDISLIB_20141027 - библиотека включает 114 спектров синтетических каннабимиметиков (в основном в виде ПФП и ТМС производных) в формате AMDIS с фиксированными временами удерживания (RTL) для колонок HP-5ms и VF-5ms (Agilent, 30 м × 0.25 мм × 0.25 мкм) соответственно к информационным письмам ННЦН. В библиотеку включены только практически значимые аналиты;

Авторы включенных масс-спектров:

- Григорьев Андрей Михайлович (Белгород, СХО),
- Катаев Сергей Сергеевич (Пермь, СХО),
- Васильев Андрей Борисович (Чебоксары, РНД),
- Мелентьев Алексей Борисович (Челябинск, СХО),
- Лабутин Андрей Валерьевич (Томск, КДЛ),
- Печников Александр Леонидович (Салехард, СХО),
- Шитов Леонид Николаевич (Ярославль, ХТЛ),
- Гофенберг Мария Александровна (Екатеринбург, КДЛ),
- Снятков Александр Валерьевич (Владимир, СХО),

- Колосова Мария Викторовна (Красноярск, КДЛ),
- Самышкина Наталья Васильевна (Новый Уренгой, КДЛ),
- Малышкина Анна Павловна (Ноябрьск, КДЛ),
- Ризванова Лилия Наджиповна (Нижевартовск, КДЛ),
- Подоленко Елена Викторовна (Сургут, КДЛ),
- Джурко Ю. А. (г.Ярославль, СХО).

Составитель-редактор SUDMED_1465: [Печников А.Л. petchnikov@gmail.com](mailto:petchnikov@gmail.com) (Салехард, СХО),

Составитель-редактор SUDMED_LC-MS-MS: [Лабутин А. В. lav877@rambler.ru](mailto:lav877@rambler.ru) (Томск, КДЛ)

Составитель-редактор SAV50/SAV_TMSR4/PB_FUB_CHM_ALL_V8: [Савчук С. А.](#) (Москва, ННЦН)