ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС "АИПСИН АНТИНАРКОТИКИ" – ЭФФЕКТИВНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ ХИМИКО- ТОКСИКОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

УДК 621.384.8
БАК 02.00.02

Колосовская Е.Ю., Павловец Ю.С., "БелХард Девелопмент", ysp@aipsin.com,
Юрченко Р.А., Белорусский государственный университет, yurchenko@aipsin.com

В статье рассматриваются основные возможности программного комплекса "АИПСИН Анти-Наркотики". Раскрывается потенциал его использования в химико-токсикологических исследованиях, включая процедуры идентификации и квалификации объекта исследования, расчета хроматографических индексов удерживания и спектральной деконволюции.

В настоящее время процесс противодействия незаконному распространению наркотиков и их потреблению претерпевает глобальные изменения, в том числе в методах идентификации и контроля психоактивных веществ. Все большее значение приобретает превентивный характер предоставления информации в организации, задействованные в борьбе как с незаконным оборотом наркотиков, так и наркозависимостью [1].

Одним из основных методов идентификации токсикологически значимых веществ в биологическом материале является хромато-масс-спектрометрия. Однако возможности данного метода в области судебно-химических и химико-токсикологических исследований во многом определяются программным обеспечением, а также наличием полных и актуальных библиотек масс-спектров [2]. В сложившейся ситуации в области идентификации и контроля психоактивных веществ востребованным инструментом, обеспечивающим сбор, обработку, а также анализ информации, является программный комплекс "АИПСИН АнтиНаркотики" (далее – АИПСИН).

ВОЗМОЖНОСТИ И ОСОБЕННОСТИ АИПСИН

Программный комплекс предназначен для информационного обеспечения деятельности госструктур как в сфере борьбы с незаконным оборотом психоактивных веществ, так и при контроле легального оборота психоактивной продукции, социально опасных веществ и связанных с ними объектов [3]. Предоставляя сотруднику химико-токсикологической, судебно-медицинской и экспертно-криминалистической лабораторий необходимые инструменты и самую полную информацию, данный программный продукт уже сегодня позволяет значительно повысить эффективность выявления и пресечения незаконного оборота наркотических и психотропных веществ.

АИПСИН является динамичным и постоянно совершенствующим программным пакетом, который представляет собой совокупность информационно-поисковой системы и исполнительных модулей. В отличие от предлагаемых на рынке спектральных и иных баз данных, АИПСИН позволяет устанавливать статус государственного контроля вещества в рамках законодательств более 20 стран и идентифицировать его с помощью трех десятков специализированных модулей.

Информационное наполнение программного комплекса формировалось путем изучения специалистами – химиками, правоведами и экспертами – специализированной литературы, мониторинга интернет-площадок и форумов, сотрудничества с экспертными лабораториями, самостоятельной идентификации веществ по полученным от потребителей масс-спектрам, а также использования информации из открытых баз данных после ее обязательной верификации. При этом спектральная и иная информация баз данных АИПСИН формируется на основе изъятий и исследований, проводимых не только на территории Российской Федерации и Республики Беларусь, но и целого ряда других стран.

Программное исполнение комплекса представлено локальной и сетевой версиями, также на некоммерческой основе предоставляется доступ к web-версии системы, размещенной по адресу www.aipsin.com.

Отличительной чертой АИПСИН является уникальный математический аппарат, который позволяет не просто идентифицировать вещество по масс-спектру, но и квалифицировать объект исследования. Идентификация веществ автоматизирована благодаря встроенным модулям "Масс-спектральный идентификатор" и "Хромато-масс-спектральный идентификатор", которые формируют несколько форматов автоматических отчетов,

включающих в себя всю необходимую информацию для подготовки заключения. Такая автоматизация и закрытая архитектура баз данных полностью исключают влияние человеческого фактора на формирование отчета об исследовании.

Идентификация веществ осуществляется с использованием девяти основных баз, содержащих в общей сложности около 25 тыс. масс-спектров, сгруппированных по источникам информации и областям применения: криминалистическим и токсикологическим исследованиям, профилированию объектов, анализу стероидов и допинг-субстанций. Результатом идентификации является отчет, включающий в себя следующие сведения:

- результаты сопоставления масс-спектра определяемого вещества с масс-спектрами баз АИПСИН;
- обоснование идентификации;
- схему фрагментации вещества в соответствии с условиями проведения анализа;
- краткое описание предполагаемого вещества и его классификацию;
- краткое обоснование подконтрольности выявленного вещества, основанное на положениях нормативной документации и его структуре;
- возможные альтернативы идентификации;
- полную информацию по выявленному веществу из других разделов АИПСИН, а также список литературы по каждому конкретному веществу.

Хромато-масс-спектральный идентификатор воспринимает приборные файлы всех существующих форматов данных, что позволяет использовать АИПСИН с любыми моделями хромато-масс-спектрометров [4]. При этом предусмотрены возможности расчета хроматографических индексов удерживания (индексов Ковача, RI, GI), спектральной деконволюции, подключения внешних пользовательских баз масс-спектров (SUDMED, SWGDRUG, rf-des_drug_gc-ms и т.д.) и интеграции продукта с другим хроматографическим программным обеспечением (NIST, ChemStation и т.д.).

Стоит отметить, что в условиях активно развивающегося рынка "дизайнерских" наркотиков АИПСИН стал практически единственным обновляемым программным продуктом, с помощью которого в кратчайшие сроки возможна максимально полная идентификация новых психоактивных веществ, являющихся объектами злоупотребления. Например, в настоящее время в списках АИПСИН находится более 10 тыс. уже контролируемых рядом стран веществ и более 25 тыс. потенциальных к контролю. Такой подход к информационному наполнению баз данных позволяет максимально полно охватить весь перечень существующей психоактивной продукции, обеспечивая возможность быстрого реагирования

на изменение ситуации в каждой отдельной стране. Так, если в списках ООН число подконтрольных веществ с 2004 по 2018 год увеличилось с 297 до 326, что не требует комплексного подхода к формированию баз данных, то в России ситуация иная – 312 веществ в 2014 году и 534 поименованных, в том числе 142 производно образующих, в 2018 году. А с учетом всех производных выходит еще более внушительная цифра. В этих условиях необходимо быстрое и оперативное обновление баз данных на основании уже имеющихся наработок.

Библиотеки масс-спектров обновляются не реже 4–5 раз в год для стационарной версии АИПСИН и не реже 20 раз в год в web-варианте. Это обеспечивает превосходство над большинством коммерческих спектральных баз данных, которые представлены либо необновляемыми продуктами, либо периодичность их обновления недостаточна для оперативного выявления новых объектов рынка психоактивной продукции (так, популярные базы NIST, DD и MPW обновляются не чаще одного раза в год). Разработчики некоммерческих баз масс-спектров, например CAYMAN и SWGDRUG, формально не несут ответственности за правильность полученных результатов, объясняя это тем, что данные библиотеки предназначены только для предварительной идентификации. Преимуществом АИПСИН по сравнению с ними является обязательная верификация масс-спектров.

Превентивное информационное наполнение АИПСИН позволяет в полной мере идентифицировать следующие группы веществ:

- подконтрольные и имеющие хождение на территории РФ;
- контролируемые на территории других стран, но не контролируемые в РФ;
- более 1000 прекурсоров и, соответственно, "конструкторов", используемых в производстве психоактивной продукции;
- более 200 продуктов деструкции веществ для косвенной идентификации;
- более 6000 метаболитов контролируемых и потенциальных к контролю веществ.

ПРИМЕНЕНИЕ В ПРАКТИКЕ ХИМИКО-ТОКСИКОЛОГИЧЕСКИХ ЛАБОРАТОРИЙ

На протяжении уже более десяти лет АИПСИН успешно используется при проведении экспертиз в системах министерств внутренних дел Белоруссии, России, Казахстана, Армении, Приднестровской Молдавской Республики и ряда других стран. При этом потенциал и возможности продукта уже стали основой для его внедрения в иных органах, задействованных в борьбе с наркоугрозой, в том числе в системах судебной экспертизы и здравоохранения [5].

Рис.1. Результатом анализа является не только идентификация пика метаболита на хроматограмме, но и определение исходного вещества с установлением его статуса контроля в выбранной стране

Например, именно благодаря АИПСИН в сентябре 2014 года были впервые идентифицированы вещества PPA(N)-2201 и MDMB(N)-BZ-F, которые в настоящее время имеют хождение на территории России и стали причиной массовых отравлений и смертей среди молодежи. Аналитические данные этих веществ еще в конце 2013 года были включены в информационные базы АИПСИН, которые долгое время оставались единственными источниками для их идентификации.

В 2018 году с помощью АИПСИН в Экспертно-криминалистическом центре ГУ МВД России по Краснодарскому краю впервые были идентифицированы 1-(4-фторбензил)-1Н-индол-3-ил)-(2,2,3,3-тетраметилциклопропил) метанон (TMCP-BZ-F) и метил 3,3-диметил-

2-(1-(5-фторпентил)-1Н-индол-3-карбоксамидо) бутаноат (MDMB-2201). Там же в 2019 году было зафиксировано появление в обороте вещества метил 1-(4-фторбензил)-1Н-индазол-3-карбоксилат (MFUBINAC), которое с 27.08.2019 года стало подконтрольным. Также в России за период 2018–2019 годов с помощью АИПСИН были впервые идентифицированы метил 3,3-диметил-2-(1-(4-фторбутил)-1Н-индазол-3-карбоксамидо)бутаноат (MDMB(N)-073-F), 1-(4-цианобутил)-N-(1-метил-1-фенилэтил)индазол-3-карбоксамид (SUMYL-4-CN-BINACA), N-(1-амино-3,3-диметил-1-оксобутан-2-ил)-1-бутил-1Н-индазол-3-карбоксамид (MMBA(N)-073) и 2-(2,5-диметокси-4-метилфенил)-2-метоксиэтиламин (BOD (beta-METHOXY-2C-D)).

Рис.2. Инструмент "Деконволюция" позволяет проводить обработку масс-спектра и его идентификацию по базам АИПСИН или подключенным внешним пользовательским базам

Согласно отзывам экспертных организаций МВД России, в 2017 году после внесения изменений в "Перечень наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров, подлежащих контролю в Российской Федерации" [4], именно благодаря своевременному оперативному обновлению АИПСИН удалось избежать ошибок при формулировании экспертных выводов о статусе контроля вещества (2,2,3,3-тетраметилциклопропил)-[1-(5-фторпентил)-1Н-индол-3-ил]метанон (ТМСР-2201). Напомним, что в перечень была включена позиция "3-(2,2,3,3-тетраметилциклопропанкарбонил)индол и его производные, за исключением производных, включенных в качестве самостоятельных позиций в перечень", в связи с чем, согласно методическим подходам по отнесению соединений к производным наркотических средств и психотропных веществ, с 28.01.2017 изменился и статус контроля указанного вещества. Таких примеров много, а вывод один – комплексный подход к информационному обеспечению эксперта в сочетании с превентивным предоставлением информации является залогом минимизации ущерба, наносимого лабильностью наркорынка.

Использование АИПСИН в практике химико-токсикологических исследований также показывает его высокую эффективность. Благодаря специальным модулям он позволяет составить максимально полный аналитический профиль исследуемого объекта с учетом его происхождения, в том числе и для изучения биологических образцов. В частности, приложения "Масс-спектральный идентификатор" и "Хромато-масс-спектральный идентификатор" могут успешно применяться в рамках химико-токсикологических исследований для интерпретации данных хроматограмм. В качестве примера можно указать на опыт ГБУЗ "Бюро судебно-медицинской экспертизы" из Санкт-Петербурга, где система применяется прежде всего при проведении скрининговых исследований. По мнению к.фарм.н. Т.В. Горбачевой, "наглядным примером возможностей информационно-поисковой системы при идентификации ксенобиотиков в биологических объектах являются случаи определения α-PVP (α-пирролидиновалерофенон) и его метаболита – 2-оксо-PVP" [2].

Преимущество АИПСИН состоит в том, что результатом анализа является не просто отчет об иденти-

Рис.3. В "Хромато-масс-спектральном идентификаторе" можно рассчитать индексы удерживания и сравнить их с данными базы АИПСИН

фикации пика на хроматограмме, но также, с учетом пробоподготовки и существующих схем метаболизма, определение исходного вещества, метаболиты которого обнаружены в биообразце, с установлением его статуса контроля в выбранной стране (рис.1).

В решении каждой задачи задействуется большое количество баз данных и специальных инструментов. Например, для обработки информации об образцах со сложной матрицей или при неполном хроматографическом разделении компонентов можно воспользоваться инструментом "Деконволюция" в "Хромато-масс-спектральном идентификаторе", позволяющим проводить предварительную обработку масс-спектра и последующую его идентификацию по базам АИПСИН или подключенным внешним пользовательским базам (рис.2). Также в "Хромато-масс-спектральном идентификаторе" существует возможность расчета значений индексов удерживания (Ковача, RI, GI) и сличения их с имеющимися в базе данных АИПСИН (рис.3).

ЛИТЕРАТУРА

1. Государственная межведомственная программа "Комплексная реабилитация и ресоциализация потребителей наркотических средств и психотропных веществ". URL: <http://programma.x-pdf.ru/16raznoe/162675-1-gosudarstvennaya-mezhvedomstvennaya-programma-kompleksnaya-reabilitaciya-resocializaciya-potrebiteley-narkoticheskikh-sredstv.php> (дата обращения: 20.08.2019).
2. Бычков В.А., Горбачева Т.В. Возможности ИПС "АИПСИН Антинаркотики" для рутинных ХТИ (постер) // Судебная медицина. Наука. Практика. Образование. 2016. Т. 2. № 2. С. 115–116.
3. Мисник В.Л., Юрченко Р.А. Современные технологии в борьбе с незаконным оборотом наркотиков – проблемы и перспективы // Мат-лы международной научно-практической конференции "Подготовка кадров для субъектов системы обеспечения национальной безопасности.

Приложение "Масс-спектральный идентификатор", благодаря интеграции с другим хроматографическим программным обеспечением, например AMDIS, позволяет проводить предварительную обработку хроматограмм в привычном для пользователей инструменте, а затем выполнять идентификацию вещества по базам масс-спектров АИПСИН.

Внедрение программного комплекса "АИПСИН Анти-Наркотики" в учреждениях Министерства здравоохранения РФ, вовлеченных в сферу борьбы с распространением и потреблением наркотиков, в первую очередь в лабораториях химико-токсикологического анализа, позволит значительно повысить эффективность их работы. При этом, благодаря содержащимся в АИПСИН регулярно обновляемым базам данных по находящимся в незаконном обороте наркотическим и психотропным веществам, может быть значительно усовершенствована процедура первичного наркологического освидетельствования.

История и современность", Минск, 22.12.2016. Т. 2. Минск, 2017. С. 16–20.

4. Постановление Правительства РФ № 681 от 30.06.1998 (ред. от 09.08.2019) "Об утверждении перечня наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров, подлежащих контролю в Российской Федерации". URL: <http://pravo.gov.ru/proxy/ips/?docbody=&nd=102053928> (дата обращения: 20.08.2019).
5. Павловец Ю.С., Мисник В.Л., Юрченко Р.А. Информационно-поисковая система "Аипсин АнтиНаркотики" как инструмент борьбы с наркотерроризмом // Мат-лы научно-практической конференции "Технические средства охраны для обеспечения комплексной безопасности объектов и территорий государства: проблемы и перспективы развития". М.: МВД России, 2016. С. 311–313.

ЛАБОРАТОРИЯ И ПРОИЗВОДСТВО

ОТКРЫТА ПОДПИСКА НА 2020 ГОД

СТОИМОСТЬ: 1840 руб. за номер

ПЕРИОДИЧНОСТЬ: 1 раз в два месяца (6 номеров в год)

ЧИТАТЕЛЯМ, оформившим подписку до 20 декабря 2019 года, СКИДКА 20%

ПОДРОБНО: labpro-media.ru

В КАЖДОМ НОМЕРЕ:

ИНТЕРВЬЮ ведущих экспертов

РЕПОРТАЖИ о современных высокотехнологичных производствах и опыте лучших лабораторий

ПОДРОБНЫЕ ОБЗОРЫ крупнейших профессиональных форумов: выставок, симпозиумов, конференций

БИЗНЕС-АНАЛИЗ российских и зарубежных рынков

АКТУАЛЬНЫЕ СТАТЬИ
авторитетных специалистов

ДИСКУССИИ по важнейшим проблемам науки, бизнеса, производства

СОБЫТИЯ и НОВОСТИ

ДЛЯ ВСЕХ, КТО ПРИНИМАЕТ РЕШЕНИЯ!