

Библиотека масс-спектров диагностически значимых субстанций и фармацевтических препаратов

Гуськова Екатерина Андреевна, Кулябина Е.В., Мелкова О.Н., Кирилук А.А.

ФГУП «ВНИИМС», Российская Федерация

E-mail: e.guskova@vniims.ru

Сегодня масс-спектрометрия широко применяется для идентификации образцов материалов в различных областях промышленности. При этом необходимым элементом при масс-спектрометрической идентификации является наличие обширной базы масс-спектров не только различных веществ, но и одного и того же вещества полученного при разных условиях. Необходимым условием для получения достоверной информации о составе анализируемого вещества является наличие оцененного уровня неопределенности и установленная прослеживаемость полученных спектров веществ. В данной статье рассмотрены результаты работ по созданию библиотеки масс-спектров диагностически значимых субстанций и фармацевтических препаратов для получения достоверных данных при проведении измерений с целью выявления состава субстанции. Основой для составления таблиц явились масс-спектры, полученные в условиях воспроизводимости методом времяпролетной тандемной масс-спектрометрии высокого разрешения. Была рассчитана оценка неопределенности полученных данных. Результаты работ были утверждены в 2018 году в качестве таблиц ГСССД. В дальнейшем полученные масс-спектры могут быть использованы при создании новой базы данных масс-спектров, которая будет дополнять существующие данные, а также имя установленную прослеживаемость, сможет быть использована при проведении измерений в области государственного регулирования.

Diagnostically significant substances and pharmaceutical preparations mass spectra library

Guskova E.A., Kuliabina E.V., Kirilyk A.A., Melkova O.N.

FGUP VNIIMC, Russian Federation

E-mail: e.guskova@vniims.ru

The paper describes the results of creating a diagnostically significant substances and pharmaceutical preparations mass spectra library. Today, mass spectrometry is widely used to identify samples in various industries. A necessary element in mass spectrometric identification is extensive base of mass spectra, not only various substances, but also the same substance mass spectra provided under different conditions. An estimated level of uncertainty and the established traceability of the obtained spectra of substances is necessary for obtain reliable information about composition of the substance. The mass spectra obtained under reproducible conditions using high-resolution time-of-flight tandem mass spectrometry. The estimated uncertainty of the data was calculated. The results of the work approved as standard reference data tables. The data given in the standard reference data tables can be used in government regulation fields. The obtained mass spectra can be used to create a new database of mass spectra, which will complement the existing data.