

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра аналитической химии**

ДЕМЧЕНКО АНАСТАСИЯ СЕРГЕЕВНА

**ТЕСТИРОВАНИЕ И ИСПРАВЛЕНИЕ ОШИБОК ПРИЛОЖЕНИЯ
ДЛЯ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПОДБОРА ИОНОВ В SIM-РЕЖИМЕ
(AIP SIN SIM PLANNER) С ЦЕЛЬЮ ПОВЫШЕНИЯ
ДОСТОВЕРНОСТИ ИДЕНТИФИКАЦИИ НАРКОТИЧЕСКИХ
ВЕЩЕСТВ В БИООБРАЗЦАХ**

Дипломная работа

Научный руководитель:

Ассистент кафедры
аналитической химии БГУ
Юрченко В.Р. _____

ДОПУЩЕНА К ЗАЩИТЕ

"__" _____ 2024 г.

Зав. кафедрой аналитической
химии, доктор хим. наук, доцент
Заяц М.Ф.

Минск, 2024

РЕФЕРАТ

Дипломная работа состоит из 48 страниц, содержит 26 рисунков и 2 таблицы. Целью дипломной работы является изучить режимы полного ионного тока и мониторинга выбранных ионов в газовом хроматографе с масс-селективным детектором, установить порог концентраций, который может определять SIM- и SCAN-режимы, применить новое приложение AIPSIN SIM-PLANNER для подбора основных характеристических масс для полученных хроматограмм сложной системы и биобразцов, содержащих наркотические и лекарственные вещества и дать оценку эффективности данного приложения для использования в дальнейшем экспертными лабораториями. Для достижения данной цели были решены следующие задачи: создана сложноматричная система с низким содержанием лекарственных препаратов, проведена пробоподготовка биобразцов (кровь, моча, внутренние органы), осуществлен анализ данных образцов с помощью газовой хромато-масс-спектрометрии, обработаны полученные результаты. В ходе выполнения работы были получены хроматограммы сложноматричной системы с лекарственными веществами, биологических образцов, содержащих в своем составе наркотические и лекарственные компоненты, установлены основные характеристические массы для обнаруженных наркотических веществ и лекарственных препаратов с помощью приложения AIPSIN SIM-PLANNER, и обнаружены и устранены некоторые ошибки в работе данного приложения.

Ключевые слова: газовая хроматография, масс-спектрометрия, наркотические и психотропные вещества, лекарственные препараты, биологические объекты, AIPSIN SIM-PLANNER.

РЕФЕРАТ

Дипломная работа складається з 48 сторінок, містить 26 малюнків і 2 таблиці. Метою дипломної роботи є вивчити режими повного іонного току і моніторингу обраних іонів у газовому хроматографі з мас-селективним детектором, встановити поріг концентрацій, які можуть визначати SIM- і SCAN-режими, застосувати нове застосування AIPSIN SIM-PLANNER для підбору основних характеристичних мас для отриманих хроматограм складаної системи і біообразців, які містять наркотичні і лікарські речовини і дати оцінку ефективності даного застосування для використання в подальшому експертними лабораторіями. Для досягнення цієї мети були вирішені наступні задачі: створена

складанаматрычная сістэма з нізкім сужэрэннем лекавых прэпаратаў, праведзена пробападрахтоўка біўзораў (кроў, мача, унутраныя органы), ажыццёўлены аналіз дадзеных узораў з дапамогай газавай храмата-мас-спектраметрыі, апрацаваны атрыманыя вынікі. У ходзе выканання работы былі атрыманы храматаграмы складанаматрычнай сістэмы з лекавымі рэчывамі, біялагічных узораў, якія маюць у сваім складзе наркатычныя і лекавыя кампаненты, устаноўлены асноўныя характарыстычныя масы для выяўленых наркатычных рэчываў і лекавых прэпаратаў з дапамогай прыкладання AIPSIN SIM-PLANNER, і выяўлены і ліквідаваны некаторыя памылкі ў працы дадзенага прыкладання.

Ключавыя словы: газавая храматаграфія, мас-спектраметрыя, наркатычныя і псіхатропныя рэчывы, лекавыя прэпараты, біялагічныя аб'екты, AIPSIN SIM-PLANNER.

ABSTRACT

The paper consists of 48 pages, contains 26 figures and 2 tables. The purpose of the thesis is to study the modes of total ionic current and monitoring of selected ions in gas chromatograph with mass-selective detector, to establish the threshold of concentrations that can determine SIM- and SCAN-modes, to apply the new application AIPSIN SIM-PLANNER for selection of basic characteristic masses for the obtained chromatograms of complex system and biosamples containing narcotic and medicinal substances and to evaluate the effectiveness of this application for further use by expert laboratories. To achieve this goal the following tasks were solved: a complex matrix system with a low content of drugs was created, sample preparation of biosamples (blood, urine, internal organs) was carried out, these samples were analyzed by gas chromatography-mass spectrometry, and the obtained results were processed. The chromatograms of the complex matrix system with drug substances, biological samples containing narcotic and medicinal components were obtained, the main characteristic masses for the detected narcotic substances and medicinal preparations were established with the help of AIPSIN SIM-PLANNER application, and some errors in the work of this application were detected and eliminated.

Keywords: gas chromatography, mass spectrometry, narcotic and psychotropic substances, pharmaceuticals, biological objects, AIPSIN SIM-PLANNER.