

## **Mass Spectrometric analytical screening data processing of prohibited substances in sports antidoping**

Konstantinos Georgakopoulos

Laboratory of Pharmaceutical Analysis, Faculty of Pharmacy, University of Athens

Anti-doping analysis in sport is aimed at detecting the prohibited substances of the International Standard of Prohibited List (<https://www.wada-ama.org/en/prohibited-list>) in urine and blood. Most of the banned substances are small molecules: 400-500 molecules of metabolites of the banned substances. Their detection is done by mass spectrometry linked to gas and liquid chromatography. A batch of routine analysis of 50 samples generates, depending on the method, 20,000-30,000 ion chromatograms. An average anti-doping laboratory analyzes 4-5 batches a week. The chromatograms are tested one-to-one by two members of the laboratory staff, in time immediately after the completion of the batch analysis and without tolerance to human errors-omissions. The current presentation includes some ways to automate and additionally exploit this wealth of analytical data.

### **Τρόποι επεξεργασίας αναλυτικών δεδομένων φασματομετρίας μάζας σάρωσης απαγορευμένων ουσιών στον έλεγχο αντιντόπινγκ**

Κων/νος Γεωργακόπουλος

Εργαστήριο Φαρμακευτικής Ανάλυσης, Τομέας Φαρμακευτικής Χημείας, Τμήματος Φαρμακευτικής ΕΚΠΑ

Η ανάλυση αντιντόπινγκ στον αθλητισμό έχει στόχο την ανίχνευση των απαγορευμένων ουσιών του International Standard of Prohibited List (<https://www.wada-ama.org/en/prohibited-list>) στα ούρα και στο αίμα. Το μεγαλύτερο μέρος των απαγορευμένων ουσιών είναι μικρά μόρια: 400-500 μόρια μεταβολιτών των απαγορευμένων ουσιών. Η ανίχνευσή τους γίνεται με φασματομετρία μάζας συνδεδεμένη με αέρια και υγρή χρωματογραφία. Μία παρτίδα ρουτίνας ανάλυσης 50 δειγμάτων δημιουργεί, ανάλογα με τη μέθοδο 20,000-30,000 ιοντικά χρωματογραφήματα. Ένα μέσο εργαστήριο αντιντόπινγκ αναλύει 4-5 παρτίδες εβδομαδιαίως. Τα χρωματογραφήματα ελέγχονται ένα-προς-ένα από δύο μέλη του προσωπικού του εργαστηρίου, σε χρόνο αμέσως μετά την ολοκλήρωση της ανάλυσης της παρτίδας και χωρίς ανοχή σε ανθρώπινα λάθη-παραλείψεις. Η τρέχουσα παρουσίαση περιλαμβάνει μερικούς τρόπους αυτοματοποίησης και επιπρόσθετης εκμετάλλευσης αυτού του πλούτου των αναλυτικών δεδομένων.