

MS/MS 在刑事科学技术中的一些应用*

徐建中

(公安部第二研究所 北京 100038)

[摘要] 本文报道应用 MS/MS 技术对一些复杂的混和物、药物以及代谢物进行结构分析。MS/MS 能直接提供代谢物的定性结构信息, 方便可靠, 取得了较好的应用效果。

关键词: MS/MS 炸药 海洛因

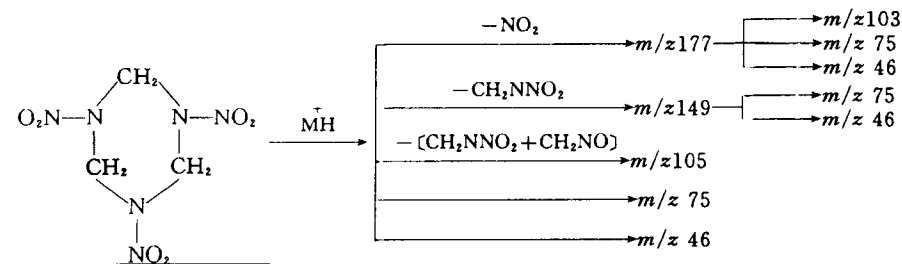
1 前言

目前 GC/MS 在刑事科学技术中已经得到广泛的应用^[1], 而对于某些结构相似的化合物来说, EI 谱图就不可能是 1 种权威性的测试结果, 例如麻黄碱和假麻黄碱 EI 谱图一样^[2], 海洛因有几个异构体, 这是 GC/MS 无法解决的问题。有些化合物的 GC 保留时间一样, 所得到的是一张“混合”质谱图, 无法解析, 因而是无效数据。用 GC/MS/MS 及固体样品直接进样的 MS/MS 分析可解决上述难题^[3], 特别对混合物采用直接进样的 MS/MS 检测, 既节省时间, 又可获得可靠的质谱数据。我们采用 MS/MS 对毒品、炸药及药物进行分析, 获得了可靠的质谱数据和成功的实际应用。

2 实验

仪器为 Finnigan MAT TSQ-70 GC/MS/MS 三级四极质谱仪。实验条件: 电子倍增器电压 1300~1600V, 色谱柱 DB-5, 化学源反应气甲烷, 碰撞气氩, 碰撞能量 -16V。

2.1 由于炸药分析主要是对爆后残余物的分析, 而大多数爆炸物含有亲电的硝基部分, 对化学电离(CI)比较灵敏, 采用混合物直接进样方法进行 CI/MS/MS 分析, 可获得较理想的结果, 如炸药黑索金(RDX)的分子峰 $m/z 222$, CI 质谱图可获得 $(M+1)^+$ 离子, MS/MS 谱可获得它的子离子及母离子, 见图 1、2。黑索金的裂解可描述为下列过程。



1994 年 7 月 20 日收

* 第 6 届全国 F 四极质谱学术会议论文

以上研究表明,用 MS/MS 技术测定炸药是有效的途径之一。这种方法简单快速,样品用量少。

2.2 对海洛因进行定性分析一般采用 GC/MS,而确定异构体采用的 MS/MS 分析则是非常有效的手段。如海洛因分子峰 m/z 369,子离子为 m/z 327、310、204,见图 3。海洛因异构体的子离子为 m/z 327、284、228^[3],

2.3 从某种营养保健品中提取混合物进行 GC/MS 分析,图 4 为混合物的色谱图,1117"是我们想确定的化合物的色谱峰,图 5 是 1117"的质谱图,而该样品的标准图谱没有 159 峰,这就要确定 159 峰是该样品峰还是杂质峰。为此分析 m/z 312、270、255 的子离子及 159 峰的母离子,见图 6。通过 GC/MS/MS 分析确定 m/z 159 是杂质峰,从而为最后确定化合物的结构提供了可靠的数据。

GC/MS/MS 是分析混合物中各组份的有效和方便的方法,是研究化合物结构强有力的手段,能提供结构信息,并具有从不相关的离子中分离出感兴趣离子的能力。

3 结束语

从上述 MS/MS 应用看出串联质谱可以减少或消除样品基质中无关物的干扰,这种分析技术可使一些色谱难题简化,或者可减少分析前对样品的提纯次数。已被充分证明的另一特点是由诸如化学电离(CI)等“软”电离技术所形成的丰度较大的分子离子,可用 MS/MS 加强其碎裂反应,因而提供结构信息。此外,MS/MS 还有一特点是它能提供子离子或母离子的结构特征之间的关系,包括产生各种不同的碎片离子,而对于药物代谢作用以及原始药物及其代谢之间的关系可进行直接类比。因此可以确信三级四级质谱在刑事鉴定科技领域中将会获得广泛的应用。

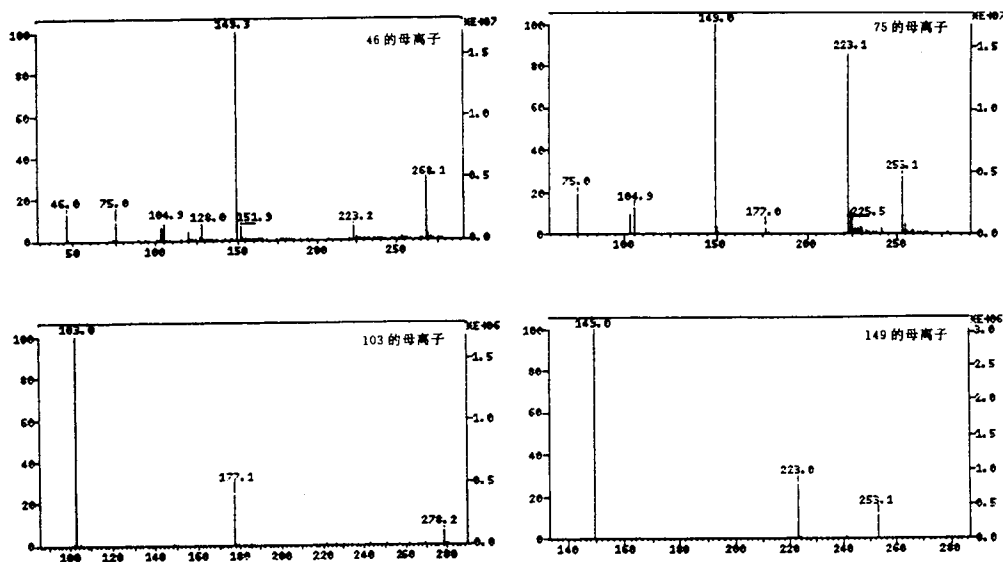


图 1 黑素金的 CID 母离子谱图

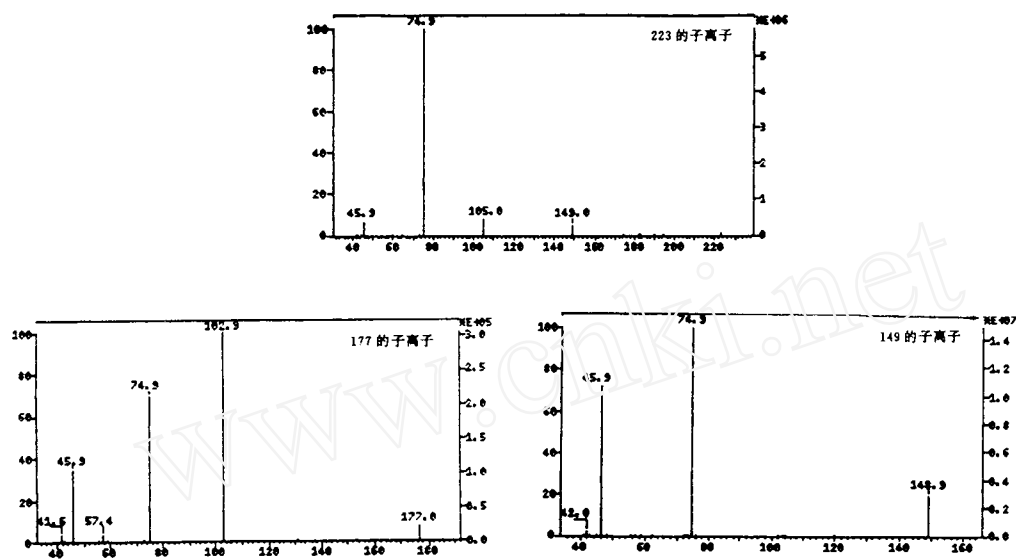


图 2 黑索金的 CID 子离子谱图

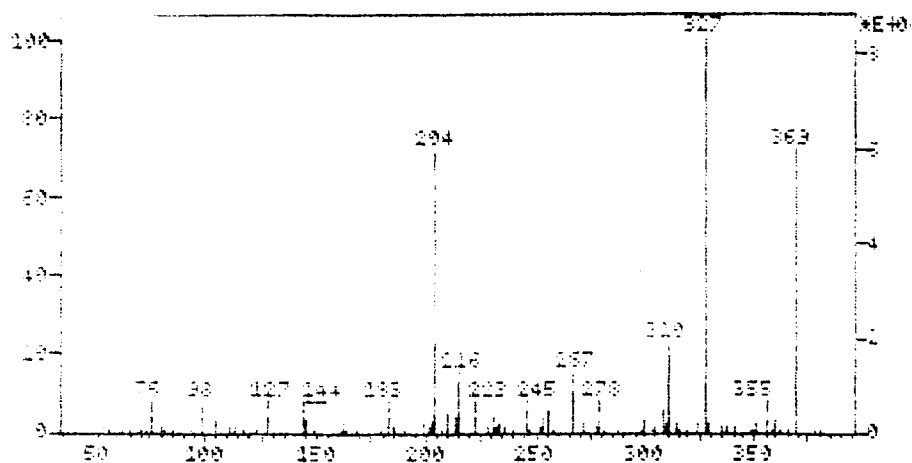


图 3 海洛因的 CID 子离子谱图

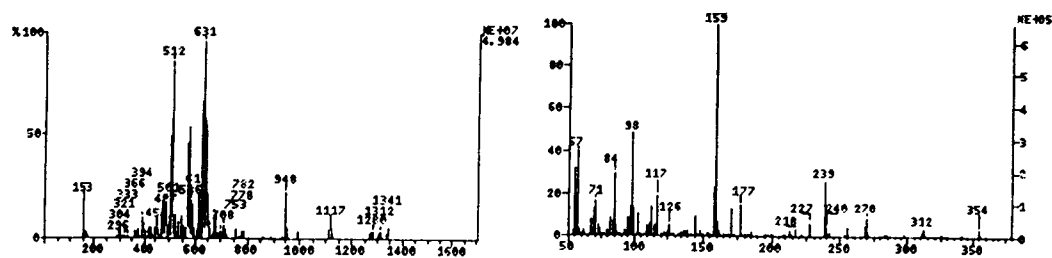


图 4 药物 1117 的总离子流色谱图

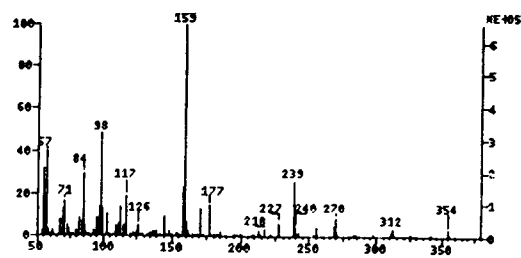
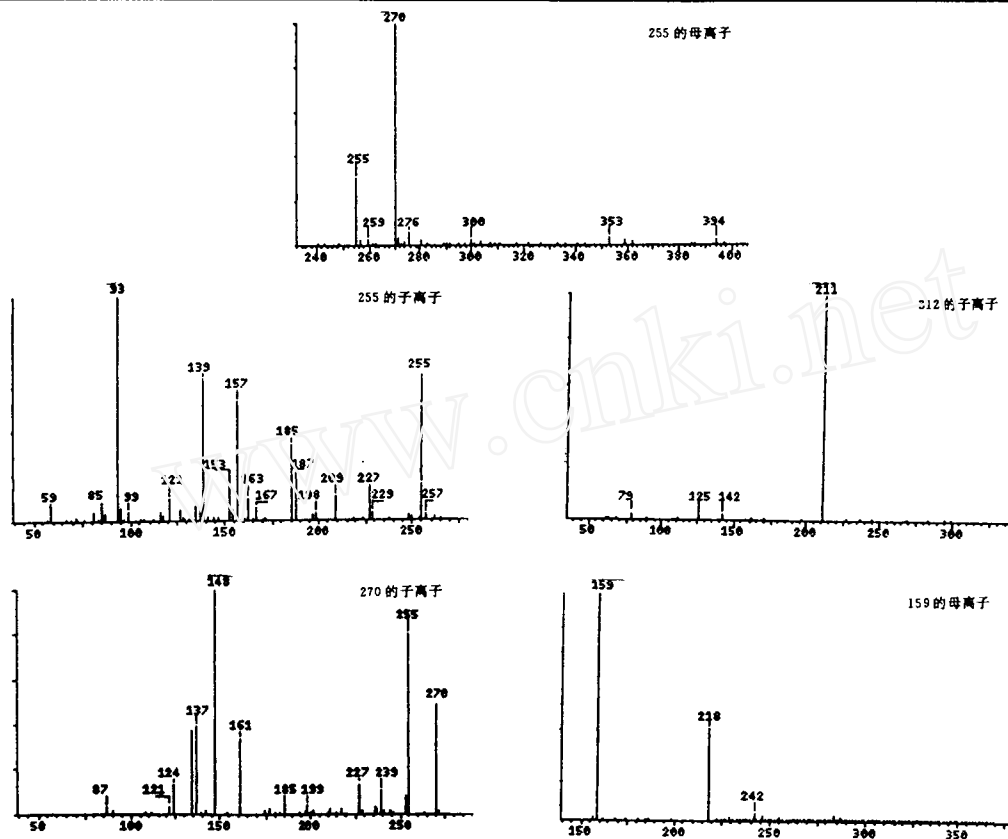


图 5 药物 1117 的 EIMS 图

图 6 药物 1117[#] 的 CID 谱图

参 考 文 献

- 1 Donald Cooper. *Stecpra*, 1988; 5:7
- 2 A H B Wu *et al.* *Journal of Analytical Toxicology*, 1992; 16(2):137-141
- 3 R L Foltz. *International Journal of Mass Spec and Ion Processes*, 1992; 118/119:327-363

Application of MS/MS to Forensic Science

Xu Jianzhong

(Institute of Forensic Science, Ministry of
Public Security, Beijing 100038, China)

Received 1994-07-20

Abstract

In this paper it describes the identification of residues of explosives, narcotics and their metabolites using MS/MS technique. A direct probe made used for the analysis of above mentioned mixture samples has the advantages that it saves time consuming in sample treatment and also obtains the reliable data available to diagnosis. The MS/MS technique will have extensive prospect in the application of forensic science.

Key Words: MS/MS, explosive, narcotic