

液相色谱-飞行时间质谱仪用于滥用药物的扫描

王 颖, 梁 峰, 李 平

(安捷伦科技有限公司, 北京 100022)

Screening Analysis by LC/TOF-MS for Abuse Drug

WANG Ying, LIANG Feng, LI Ping

(Agilent Technologies Ltd. Co., Beijing 100022, China)

Abstract: The screening of abuse drugs in human samples has relevance in much of today's society; employers, police and prison officials and forensic pathologists all rely on the accuracy of drug screening. This application presents the potential for the Agilent time-of-flight mass spectrometer (LC/MS-TOF) for the use as both a screening and a confirmation tool in one analytical run of 30 minutes.

Key words: LC/TOF-MS; abuse drugs

中图分类号: O657.63 文献标识码: A 文章编号: 1004-2997(2006)增刊-144-02

液相色谱/飞行时间质谱的精确质量特性大大增强了药物确认的可信度, 它可以减少可能目标化合物的数量。质量的精确度越高, 理论上可能的化合物越少, 化合物的分子式的可信度越高。对于多种来源的样品的分析, 这种技术是非常有用的, 因为样品可能含有各种干扰物, 如爆炸残留物的分析。本应用方法介绍了利用安捷伦的液相色谱/飞行时间质谱进行筛查和确认滥用药物。安捷伦的飞行时间质谱具有更宽的线性范围, 更高的质量精度 (<3 ppm), 是用于筛查及确认各种滥用药物的理想技术。本应用不仅可以用于某一类药物以达到更低的检测限, 而且还可以扩展到更加广泛的化合物筛查中。

1 分析方法

本试验采用的是安捷伦的 1100 液相色谱/飞行时间质谱, 包括: 二元泵, 自动进样器, 柱温箱, 二极管阵列检测器以及 G1969 飞行时间质谱仪。

色谱柱温度: $300\text{ }^{\circ}\text{C}$; 色谱柱: ZORBAX SB-Aq; $150\text{ mm}\times 2.1\text{ mm}$, $3.5\text{ }\mu\text{m}$ 。

2 质谱条件

离子源: ESI 正离子模式; 干燥气温度: $350\text{ }^{\circ}\text{C}$; 雾化器压力: 40 psi 。

毛细管电压: $3\text{ }500\text{ V}$; 扫描范围: $100\sim 1\text{ }000$; 碰撞电压: 125 V 。

表中总结了每一个化合物的检测限 (LOD)。分析方法没有对每一个化合物进行优化, 主要是用于违禁毒品的筛查方法。

化合物组分	准确质量/u	检测限 (ng/mL)	化合物组分	准确质量/u	检测限 (ng/mL)
α -羟基阿普唑仑	325.085 0	5	4'-羟基-去甲地西洋	287.058 1	0.5
7-氨基-氯硝西	286.074 1	1	去甲地西洋	271.063 2	0.5
地西洋	285.078 8	1	氟哌醇	314.093 5	1
奥沙西洋	287.058 1	5	氟西洋	388.158 6	1
替马西洋	301.073 8	5	σ -9-大麻酚	315.231 8	1
7-氨基-氟哌醇	284.109 3	5	(\pm)-11-羟基- σ -9-大麻酚	331.226 7	1
7-氨基-硝西洋	252.113 1	1	可卡因	304.154 3	1
dl-11-9-羧基- σ -9-大麻酚	345.206	5	苯酰芽子碱	290.138 6	5
可待因	300.159 4	50	丁丙诺啡	468.310 8	1
吗啡-3 β -d-葡萄糖醛酸式	462.175 8	5	吗啡	286.143 7	10
6-乙酰基吗啡	328.154 3	10	去甲吗啡	272.128	10
EDDP 高氯酸盐	278.190 3	1	哌替啶	248.164 5	1
(+)-麻黄碱	166.122 6	20	去甲哌替啶	234.148 8	1
氟苯丙胺	232.130 7	1	外消旋-马沙酮	310.216 5	1
外消旋-MBDB 盐酸盐	208.130 2	5	EMPD	264.174 6	1
(\pm)-BDB 盐酸盐	194.117 5	10	纳络酮	328.154 3	5
外消旋-亚甲二氧 基乙基苯丙胺	208.133 1	10	羟二氧可待因酮	316.154 3	20
外消旋-亚甲二氧基苯丙胺	180.102 0	50	麦角酸二乙酰胺	324.207	1
外消旋-亚甲二氧甲基苯丙胺	194.117 5	50	异麦角酸二乙酰胺	324.207	1
外消旋-甲基苯丙胺	150.127 6	20	(\pm)-苯丙醇胺盐酸盐	152.106 9	1
外消旋-安非他明	136.112	50	氟西汀盐酸盐	310.141 3	1
芬特拉明	150.127 6	20	GHB	127.036 5	20
伪麻黄碱	166.122 6	20	(-)-尼古丁	163.122 9	5
可贴宁	177.102 2	20			

3 人体样品中滥用药物的检测

从当地死因调查局取得有关的样品,利用建立的方法进行分析。从死者采来的样品经过用丁基氯提取,然后用建立的方法进行分析。样品进样之后,数据用含有 48 个典型滥用药物的数据库进行分析。样品已知含有西酞普兰(citalopram),可待因,抗敏安(doxylamine)和曲马多(tramadol)。利用本方法再分析,又发现以下一些药物:地西洋,6-乙酰吗啡,米氮平(MDMA, mirtazapine, 抗抑郁剂米氮平,商品名瑞美隆),甲基安非他命,可贴宁,哌替啶,尼古丁,结果又

表明死者也具有吸烟史。

4 结 论

本应用的结果表明,液相色谱-飞行时间质谱作为一种技术既可以筛选毒品,又可以对阳性样品中毒品化合物进行确认。在本文中,液相色谱/飞行时间质谱技术可以在 48 h 内分析常见的药物。在本文中最后的应用表明,利用液相色谱/飞行时间质谱可以用于死者样品的分析,除了法医发现的药物之外,还多发现七个其它的药物成分。