

SCIEX液质联用系统测定毛发中70种滥用药物及代谢物

Determination of 70 abused drugs and their metabolites in hair by SCIEX Liquid Chromatography-Mass Spectrometry System

程龙, 杨总, 刘冰洁

Cheng long, Yang Zong, Liu Bingjie

SCIEX中国

SCIEX China

关键词: abused drugs; LC-MS/MS

引言

近年来, 全球药物滥用问题呈复杂化、隐蔽化趋势。新型精神活性物质 (NPS) 和传统毒品滥用问题持续加剧, 滥用率居高不下。药物滥用不仅导致成瘾、器官损伤甚至死亡, 还与暴力犯罪、交通事故及公共卫生危机密切相关。在此背景下, 建立高效、精准的药物滥用监测技术, 成为禁毒执法、临床诊疗及公共卫生管理的核心需求。

毛发作为一种独特的生物检材, 因其长检测窗口期 (可追溯数月内药物暴露史)、抗篡改性 (难以通过短期戒断规避检测) 及易采集储存的特点, 被广泛应用于法医毒理学领域。然而, 毛发基质的复杂性 (高角蛋白、色素及脂质含量) 和滥用药物的多样性 (包括母体药物、代谢物及结构多变的NPS), 对检测技术的灵敏度、特异性和高通量能力提出了严峻挑战。

本实验基于SCIEX液质联用系统的高灵敏度和强抗污染优势, 建立了毛发中70种滥用药物及代谢物的高通量检测方法, 让滥用药物的检测变得更加高效快捷。

实验方法

1. 液相方法:

色谱柱: Phenomenex Kinetex Biphenyl (100 × 2.1 mm, 1.7 μm)

流动相: A相: 水 (0.1%甲酸) B相: 乙腈 (0.1%甲酸)

流速: 0.4 mL/min;

洗脱程序:

Time(min)	A (%)	B (%)
0.0	95	5
9.0	0	100
11.0	0	100
11.1	95	5
13.0	95	5

2. 质谱方法:

离子源: ESI源, 正离子模式

扫描模式: Scheduled MRM™ (离子对见附表1)

离子化电压: 5500 V

离子源温度 TEM: 550°C

气帘气 CUR: 30 psi

碰撞气 CAD: Medium

雾化气 GS1: 50 psi

辅助气 GS2: 55 psi

结果与讨论

1. 提取离子流色谱图:

本文涉及到的70种滥用药物及代谢物在设定的仪器条件下, 均有较好的保留 (色谱图见图1), 且峰型良好。

2. 方法学考察

所有化合物的灵敏度均达到pg级别以下, 灵敏度高, 满足检测需求。采用空白基质样本配置标准曲线, 所有化合物具有良好

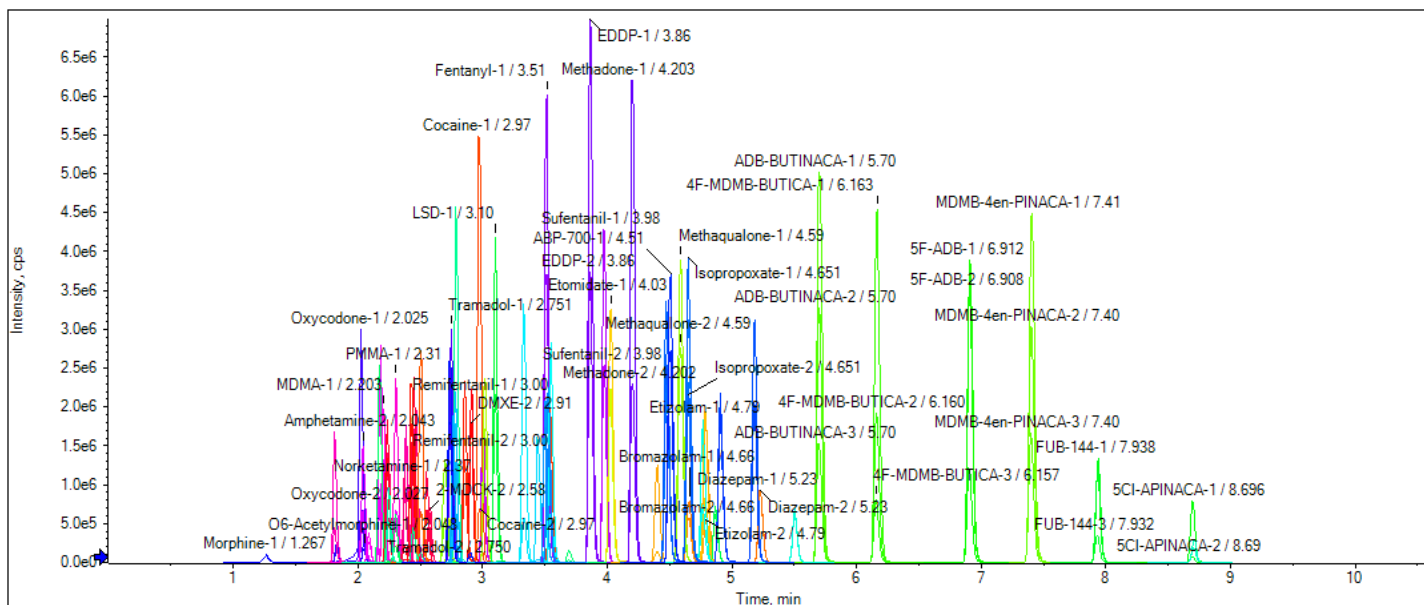


图1. 70种滥用药物及代谢物的提取离子流色谱图

的线性关系，如图2。针对本文涉及到的70种滥用药物及代谢物，在高、中、低三个浓度点下进行加标回收率实验，实际加标回收率在89.5%~110.8%范围内，符合方法学要求。同时，在三个浓度点下，连续进样（n=6）考察方法的重复性，所有化合物6次进样峰面积RSD%均在0.71%~2.98%范围内，展现了方法的可靠性以及仪器的耐受性。

3. 样品测试

针对某区域采集毛发检材进行检测，通过SCIEX OS软件对数据进行批量处理，采用“红绿灯”式离子比率判定，可直观的对化合物进行定性分析，如图3。SCIEX液质系统具有卓越的灵敏度和抗污染能力，很好的保证了测定结果的准确及可靠。

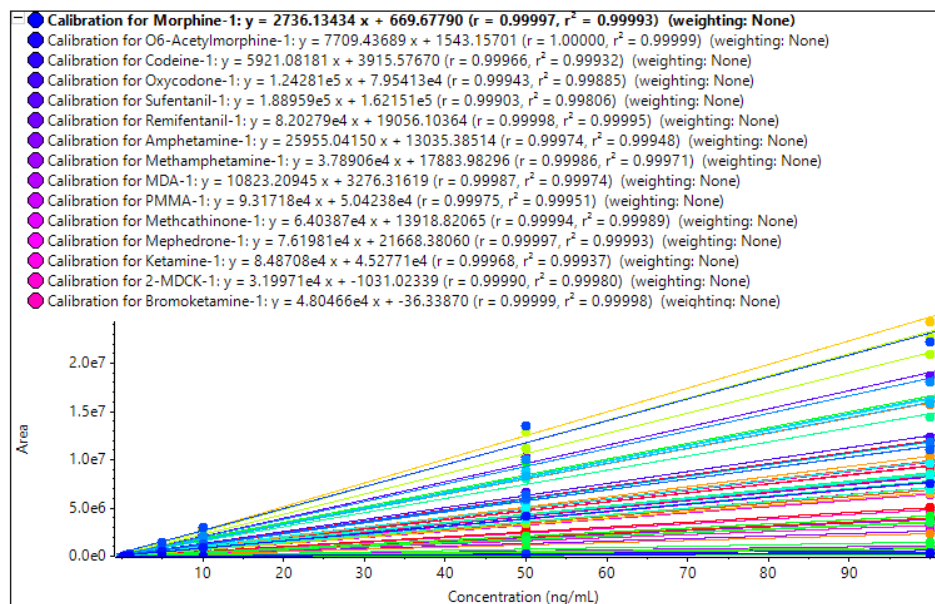


图2. 70种滥用药物及代谢物的线性关系

总结

本方案基于SCIEX液质联用系统建立70种滥用药物及代谢物的检测方法，可以实现快速、高灵敏度、高通量的检测，所有化合物均具有良好的线性关系。同时，搭配SCIEX OS软件更加智能

简洁，适合大批量样品的快速分析，为用户节省大量时间和人力成本。

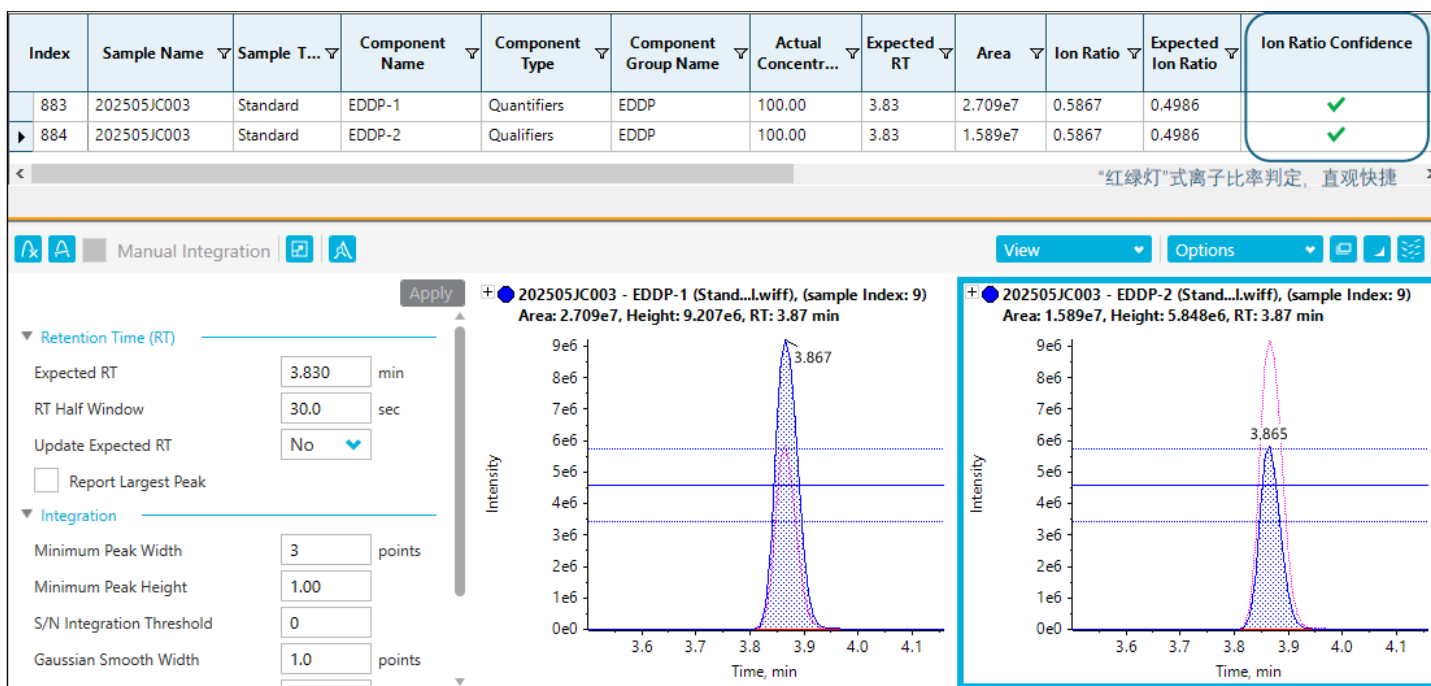


图3. SCIEX OS软件对实际样品进行处理界面展示；绿勾表示离子比率判定合格。

附表1 化合物MRM质谱参数

编号	名称	ID	Q1	Q3	DP	CE	RT (min)
1	吗啡	Morphine-1	286.1	201.1	70	36	1.25
		Morphine-2	286.1	165.1	70	57	1.25
2	O6-单乙酰吗啡	O6-Acetylmorphine-1	328.2	211.1	50	34	2.01
		O6-Acetylmorphine-2	328.2	165.1	50	48	2.01
3	可待因	Codeine-1	300.2	199.1	60	41	1.8
		Codeine-2	300.2	165.1	60	57	1.8
4	羟考酮	Oxycodone-1	316.2	298.2	35	26	1.99
		Oxycodone-2	316.2	241.1	35	40	1.99
5	曲马多	Tramadol-1	264.1	58.1	30	50	2.7
		Tramadol-2	264.1	246.2	30	16	2.7
6	美沙酮	Methadone-1	310.2	265.2	30	22	4.17
		Methadone-2	310.2	105	30	37	4.17

附表1 化合物MRM质谱参数 (续)

编号	名称	ID	Q1	Q3	DP	CE	RT (min)
7	5-二甲基-3,3-二苯基氮杂戊环	EDDP-1	278.2	234.1	30	42	3.83
		EDDP-2	278.2	249.2	30	34	3.83
8	芬太尼	Fentanyl-1	337.2	188.1	55	32	3.48
		Fentanyl-2	337.2	105.1	55	54	3.48
9	去苯乙基芬太尼	Desphenethylfentanyl-1	233.2	177.1	35	22	2.47
		Desphenethylfentanyl-2	233.2	150.1	35	26	2.47
10	舒芬太尼	Sufentanil-1	387.2	238.1	70	27	3.94
		Sufentanil-2	387.2	355.2	70	26	3.94
11	瑞芬太尼	Remifentanil-1	377.2	317.2	65	23	2.96
		Remifentanil-2	377.2	228.1	65	29	2.96
12	苯丙胺	Amphetamine-1	136.1	119.1	40	13	2
		Amphetamine-2	136.1	91.1	40	23	2
13	甲基苯丙胺	Methamphetamine-1	150.1	119.1	30	16	2.14
		Methamphetamine-2	150.1	91.1	30	27	2.14
14	MDA	MDA-1	180.1	133.1	20	25	2.04
		MDA-2	180.1	105.1	20	30	2.04
15	MDMA	MDMA-1	194.1	163.1	30	18	2.16
		MDMA-2	194.1	105.1	30	34	2.16
16	4-甲氧基甲基苯丙胺	PMMA-1	180.1	149.1	30	16	2.26
		PMMA-2	180.1	91	30	44	2.26
17	甲卡西酮	Methcathinone-1	164.1	131.1	20	28	1.78
		Methcathinone-2	164.1	105.1	20	31	1.78
18	4-甲基甲卡西酮	Mephedrone-1	178	160.1	20	19	2.34
		Mephedrone-2	178	145	20	28	2.34
19	氯胺酮	Ketamine-1	238.1	125	50	39	2.42
		Ketamine-2	238.1	207.1	50	21	2.42
20	去甲氯胺酮	Norketamine-1	224.1	207.1	20	18	2.33
		Norketamine-2	224.1	125	20	35	2.33
21	氟胺酮	Fluoroketamine-1	222.2	191.1	30	20	2.2
		Fluoroketamine-2	222.2	109	30	40	2.2
22	甲基胺酮	2-MDCK-1	218.2	187.1	20	17	2.53
		2-MDCK-2	218.2	105	20	38	2.53
23	溴胺酮	Bromoketamine-1	282	172.1	40	29	2.51
		Bromoketamine-2	282	169	40	42	2.51
24	乙基氟胺酮	2-FXE-1	236.1	109.1	20	51	2.4
		2-FXE-2	236.1	163.1	20	22	2.4

附表1 化合物MRM质谱参数 (续)

编号	名称	ID	Q1	Q3	DP	CE	RT (min)
25	替来他明	Tiletamine-1	224.1	179.1	35	15	2.2
		Tiletamine-2	224.1	151.1	35	25	2.2
26	DMXE	DMXE-1	232.2	187.1	30	20	2.87
		DMXE-2	232.2	159.1	30	26	2.87
27	2-oxo-PCE	2-oxo-PCE-1	218.2	173.1	20	18	2.4
		2-oxo-PCE-2	218.2	91.1	20	39	2.4
28	3-OH-PCP	3-OH-PCP-1	260.2	86.1	50	16	2.81
		3-OH-PCP-2	260.2	175.1	50	19	2.81
29	4MeO-PCP	4-MeO-PCP-1	274.2	189.1	30	16	3.5
		4-MeO-PCP-2	274.2	121.1	30	36	3.5
30	可卡因	Cocaine-1	304.2	182.1	65	28	2.93
		Cocaine-2	304.2	150.1	65	34	2.93
31	苯甲酰爱康宁	Benzoylcegonine-1	290.1	168.1	60	27	2.47
		Benzoylcegonine-2	290.1	105	60	41	2.47
32	地西洋	Diazepam-1	285.1	154.1	50	36	5.2
		Diazepam-2	285.1	193.2	50	42	5.2
33	波玛唑仑	Bromazolam-1	353	325	50	40	4.62
		Bromazolam-2	353	205.1	50	58	4.62
34	依替唑仑	Etizolam-1	343.1	314.1	30	37	4.76
		Etizolam-2	343.1	289.1	30	34	4.76
35	艾司唑仑	Estazolam-1	295.1	267.1	30	34	4.37
		Estazolam-2	295.1	241.1	30	37	4.37
36	尼美西洋	Nimetazepam-1	296.1	250.1	70	37	4.76
		Nimetazepam-2	296.1	221.1	70	47	4.76
37	依托咪酯	Etomidate-1	245.1	141	30	14	4
		Etomidate-2	245.1	95	30	34	4
38	地佐辛	Dezocine-1	246.2	147.1	40	27	2.69
		Dezocine-2	246.2	97.1	40	22	2.69
39	哌替啶	Pethidine-1	248.2	220.1	50	30	2.98
		Pethidine-2	248.2	174.1	50	30	2.98
40	安眠酮	Methaqualone-1	251.1	132.1	60	38	4.55
		Methaqualone-2	251.1	91.1	60	56	4.55
41	赛拉嗪	Xylazine-1	221.1	90	50	31	2.65
		Xylazine-2	221.1	164.1	50	36	2.65
42	MDMB-4en-PINACA	MDMB-4en-PINACA-1	358.2	213.1	20	34	7.38
		MDMB-4en-PINACA-2	358.2	298.2	20	21	7.38
		MDMB-4en-PINACA-3	358.2	145	20	56	7.38

附表1 化合物MRM质谱参数 (续)

编号	名称	ID	Q1	Q3	DP	CE	RT (min)
43	ADB-BUTINACA	ADB-BUTINACA-1	331.2	201.1	30	35	5.67
		ADB-BUTINACA-2	331.2	145	30	56	5.67
		ADB-BUTINACA-3	331.2	286.2	30	13	5.67
44	4F-MDMB-BUTICA	4F-MDMB-BUTICA-1	363.2	218.1	40	22	6.14
		4F-MDMB-BUTICA-2	363.2	144	40	55	6.14
		4F-MDMB-BUTICA-3	363.2	116	40	76	6.14
45	5F-ADB	5F-ADB-1	378.2	233.1	60	33	6.88
		5F-ADB-2	378.2	318.2	60	22	6.88
		5F-ADB-3	378.2	213.1	60	43	6.88
46	5CI-APINACA	5CI-APINACA-1	400.2	135.1	200	29	8.65
		5CI-APINACA-2	400.2	107.1	200	67	8.65
47	FUB-144	FUB-144-1	350.2	109	200	60	7.9
		FUB-144-2	350.2	125.1	200	30	7.9
		FUB-144-3	350.2	252.1	200	29	7.9
48	麦角二乙胺	LSD-1	324.2	223.1	40	32	3.06
		LSD-2	324.2	208.1	40	40	3.06
49	地芬诺酯	Diphenoxylate-1	453.2	187.1	80	42	4.82
		Diphenoxylate-2	453.2	379.3	80	35	4.82
50	芬特明	Phentermine-1	150.1	133.1	40	13	2.26
		Phentermine-2	150.1	91.1	40	30	2.26
51	丁丙诺啡	Buprenorphine-1	468.3	396.3	80	54	3.65
		Buprenorphine-2	468.3	267.1	80	64	3.65
52	去环丙甲基丁丙诺啡	Des-CP-buprenorphine-1	414.2	187	55	59	3.08
		Des-CP-buprenorphine-2	414.2	165.1	55	53	3.08
53	哌醋甲酯	Methylphenidate-1	234.1	84.1	50	26	2.75
		Methylphenidate-2	234.1	174.1	50	30	2.75
54	安非拉酮	Amfepramone-1	206.2	105.1	55	31	2.2
		Amfepramone-2	206.2	133.1	55	23	2.2
55	四氢大麻酚	THC-1	315.2	193.1	75	32	8.67
		THC-2	315.2	123	75	43	8.67
56	二氯西洋	Dichlorazepam-1	319	227.1	170	43	5.48
		Dichlorazepam-2	319	154.1	170	39	5.48
57	氟硝西洋	Flunitrazepam-1	314..1	268.1	100	37	4.74
		Flunitrazepam-2	314..1	239.2	100	47	4.74
58	咪达唑仑	Midazolam-1	326.1	291.2	140	38	3.5
		Midazolam-2	326.1	223.1	140	51	3.5

附表1 化合物MRM质谱参数 (续)

编号	名称	ID	Q1	Q3	DP	CE	RT (min)
59	美托尼秦	Metonitazene-1	383.2	100.1	100	29	3.29
		Metonitazene-2	383.2	72.1	100	62	3.29
60	N,N-二甲基依托尼秦	Dimethyletonitazene-1	369.2	72.1	140	52	3.4
		Dimethyletonitazene-2	369.2	107	140	77	3.4
61	Dipentylone	Dipentylone-1	250.1	100.1	60	28	2.74
		Dipentylone-2	250.1	205.1	60	22	2.74
62	N-propylbutylone	N-propylbutylone-1	250.1	202.1	40	26	2.72
		N-propylbutylone-2	250.1	174.1	40	42	2.72
63	右美沙芬	Dextromethorphan-1	272.2	171.1	45	47	3.46
		Dextromethorphan-2	272.2	213.1	45	37	3.46
64	美托咪酯	Metomidate-1	231.1	127.1	30	16	3.49
		Metomidate-2	231.1	95.1	30	37	3.49
65	丙帕酯	Propoxate-1	259.2	155.1	30	17	4.62
		Propoxate-2	259.2	95	30	35	4.62
66	异丙帕酯	Isopropoxate-1	259.2	155.1	30	14	4.44
		Isopropoxate-2	259.2	95	30	42	4.44
67	TF-Etomidate	CF3-etomidate-1	299.1	195	30	15	5.15
		CF3-etomidate-2	299.1	95	30	30	5.15
68	2,6-diCl-3F-Etomidate	2,6-diCl-3F-etomidate-1	331	141.1	50	18	4.87
		2,6-diCl-3F-etomidate-2	331	95	50	38	4.87
69	ABP-700	ABP-700-1	315.1	211.1	50	16	4.47
		ABP-700-2	315.1	95	50	31	4.47
70	2-oxo-PCPr	2-oxo-PCPr-1	232.2	91.1	40	44	2.69
		2-oxo-PCPr-2	232.2	145.1	40	26	2.69

SCIEX临床诊断产品线仅用于体外诊断。仅凭处方销售。这些产品并非在所有国家地区都提供销售。获取有关具体可用信息，请联系当地销售代表或查阅<https://sciex.com.cn/diagnostics>。所有其他产品仅用于研究。不用于临床诊断。本文提及的商标和/或注册商标，也包括相关的标识、标志的所有权，归属于AB Sciex Pte. Ltd. 或在美国和/或某些其他国家地区的各权利所有人。

© 2025 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. MKT-35589-A



SCIEX中国

北京分公司
北京市昌平区生命科学园科学园路
18号院A座一层
电话: 010-5808-1388
传真: 010-5808-1390

全国咨询电话: 800-820-3488, 400-821-3897

上海公司及中国区应用支持中心
上海市长宁区福泉北路518号
1座502室
电话: 021-2419-7201
传真: 021-2419-7333

官网: sciex.com.cn

广州办公室
广州国际生物岛星岛环北路1号
B2栋501、502单元
电话: 020-8842-4017

官方微信: [SCIEX-China](https://www.sciex.com.cn)