



利用配备高效离子源的安捷伦 GC/MS 毒理学分析仪筛查更多药物

应用简报

法医毒理学

作者

Melissa Churley 和
Luis Cuadra-Rodriguez
安捷伦科技有限公司

前言

生物样品中的广泛药物筛查不仅需要大量目标物进行全谱鉴定确认，还需要对非目标物进行谱图鉴定。安捷伦 GC/MS 毒理学分析仪采用解卷积报告软件 (DRS)、法医毒理学数据库与谱库以及高效离子源 (HES) (配置 Agilent 5977B 质量选择检测器时)。结合采用这些技术能够筛查更多数量的低浓度目标物，同时还可缩短分析时间。



Agilent Technologies

利用高效离子源实现更低浓度筛查

利用人血清得到的分析结果证明 HES 可提高筛查能力，如表 1 所示。采用 Agilent Bond Elut Certify 常规药物筛查法 M2721 对 2 mL 阴性血清进行提取 [1]。将提取物复溶于 0.1 mL 甲醇中并加入 GC/MS 毒理学校验混标（部件号 5190-0471），得到浓度为 10 - 1000 ng/mL（置于样品瓶中）的未衍生标准品。

表 1. 采用 AMDIS 以 75 的最小匹配因子检测加标血清提取物中药物时的最小进样量

	HES (HES 自动调谐)			Extractor (etune)		
	AMDIS 得分 > 75 时的最小进样量 (pg)	AMDIS 得分	血清中的等效浓度 (ng/mL)*	AMDIS 得分 > 75 时的最小进样量 (pg)	AMDIS 得分	血清中的等效浓度 (ng/mL)*
安非他明	500	94	25	500	75	25
尼古丁	50	92	2.5	50	81	2.5
MDA	500	77	25	500	76	25
MDMA	500	85	25	500	83	25
MDEA	10	76	0.5	500	97	25
哌替啶	10	85	0.5	50	85	2.5
苯环己哌啶	50	83	2.5	500	90	25
美沙酮	50	87	2.5	500	89	25
可卡因	50	77	2.5	500	94	25
SKF-525a	50	77	2.5	100	81	5
可待因	100	88	5	500	90	25
地西洋	50	90	2.5	50	81	2.5
氢可酮	100	91	5	500	90	25
四氢大麻酚	50	75	2.5	100	78	5
羟考酮	50	80	2.5	500	83	25
氯硝西洋	500	88	25	500	75	25
二乙酰吗啡	100	79	5	1000	83	25
芬太尼	50	85	2.5	50	77	2.5
阿普唑仑	100	76	5	1000	85	50
维拉帕米	50	84	2.5	500	90	25
士的宁	500	86	25	500	77	25
曲唑酮**	> 1000	(71)	> 50	> 1000	(68)	> 50

采用 HES 与 Extractor 离子源检测出的低浓度药物突出显示于表中。括号中为调谐条件。

* 假设 2 mL 血清样品的回收率为 100%，将提取物复溶至 0.1 mL 且进样量为 1 μ L。

** 如需得分达到 75，曲唑酮进样量需超过 1000 pg。

苯二氮卓类药物奥沙西洋、劳拉西洋、替马西洋、硝西洋和氯硝西洋在进样量为 1000 pg 时均无法检出。

然后向校验混标中加入合成阿片类药物芬太尼。目前采用全扫描模式可对血清中筛查出的美沙酮、可卡因、氢可酮、THC 以及其他低浓度目标药物化合物实现可靠鉴定（如氢可酮为 5 ng/mL）。HES 可使由离子源产生并传输至四极杆分析器中的离子数量大大增加，相当于通过信号的增强提高了灵敏度（图 1）。这一响应增强表现为筛查过程中能够得到更多具有高谱库匹配的目标药物。

利用异构体辨别功能获得 NIST 可检索的谱图

法医化学家需要利用最高程度的科学确定性进行滥用药鉴定。从某种程度上讲，可卡因异构体的测定问题使研究人员对高特异性方法的需求日益迫切 [2]。配备 HES 的 5977B GC/MSD 能够满足可卡因异构体辨别以及获得所检测药物的 NIST 可检索谱图对谱图完整性的严格要求（图 2）。

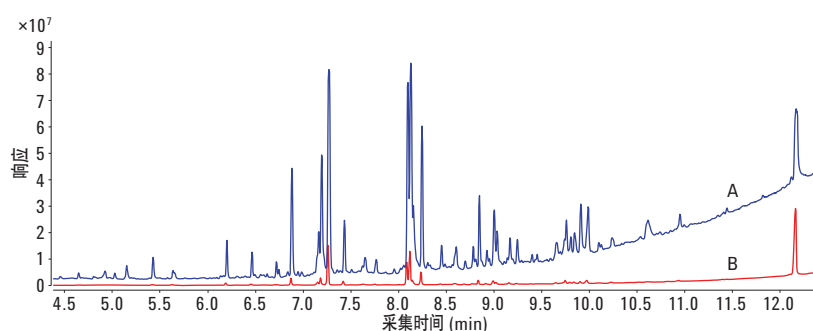


图 1.使用 A) HES 自动调谐和 B) Extractor 离子源 (etune) 检测血清中 500 pg 标准品所得到的 TIC 叠加图

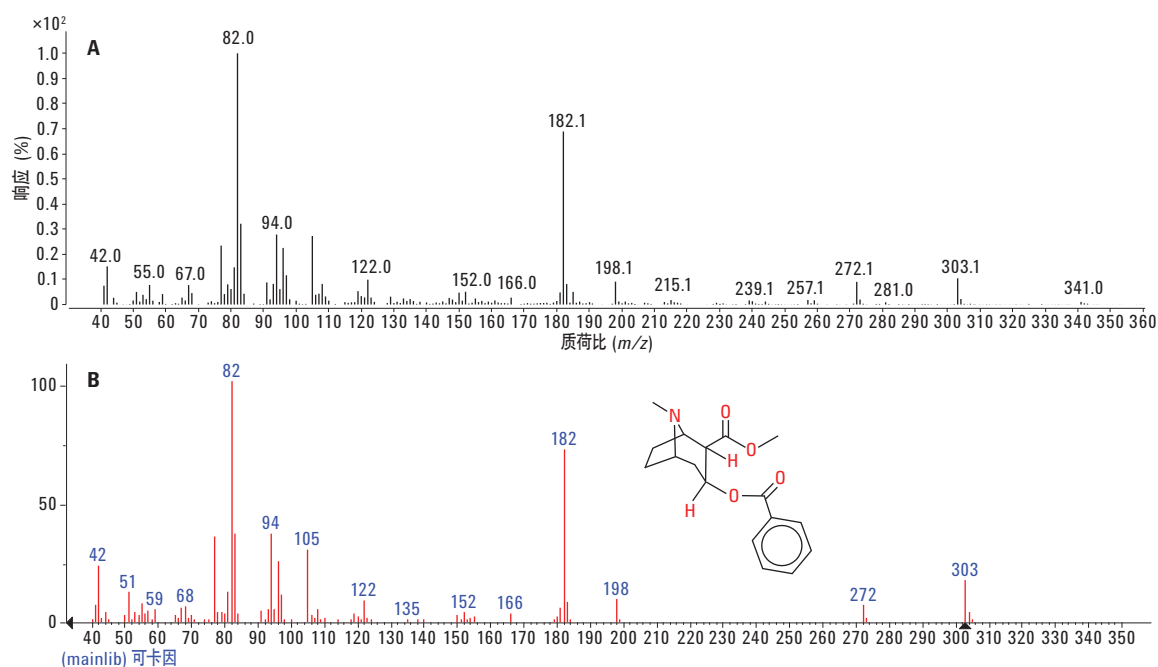


图 2.100 pg 可卡因加标血清质谱图 (A) 与 NIST 谱图 (B) 的比较结果。可卡因是 NIST 中的第一匹配结果。匹配因子为 810 (良好) [3]，可与假可卡因的 788 (一般) 区别开来。完全回收时的等效浓度为 5 ng/mL。浓度高于以上水平时可卡因将作为第一匹配结果返回，且具有出色的 NIST 谱库匹配 (≥ 900)

结论

Agilent 5977B GC/MSD 的高效离子源能够大大增强目标药物信号。得到的典型谱图可在 NIST 中进行检索。与解卷积报告软件结合后, 筛查分析检测限与 SIM 模式下通过衍生化得到的检测限接近。

致谢

作者对 Bruce Quimby 和 Fred Feyerherm 针对本文所进行的有效讨论以及 Nathan Contino 所作出的贡献表示感谢。

参考文献

1. Anon. Agilent Bond Elut Certify and Certify II Methods Manual (*Agilent Bond Elut Certify 和 Certify II 方法手册*); 安捷伦科技公司, 出版号 5991-4939EN, **2014**. <http://www.agilent.com/cs/library/brochures/Bond%20Elut%20Certify%20MethodsManual.pdf>
2. Schlesinger, H. L. Topics in the chemistry of cocaine. *B. Narcotics* **1985**, *1*, 63-78. United Nations Office on Drugs and Crime, Vienna, Austria. https://www.unodc.org/unodc/en/data-and-analysis/bulletin/bulletin_1985-01-01_1_page006.html
3. Anon. NIST Standard Reference Database 1A, NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library (NIST 14) and NIST Mass Spectral Search Program (Version 2.2), User's Guide. National Institute of Standards and Technology, U.S. Department of Commerce, Gaithersburg, MD, USA. <http://www.nist.gov/srd/upload/NIST1aVer22Man.pdf>

更多信息

这些数据仅代表典型的结果。有关我们的产品与服务的信息, 请访问我们的网站 www.agilent.com。

查找当地的安捷伦客户中心:

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线:

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们:

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价:

www.agilent.com/chem/erfq-cn

www.agilent.com

司法鉴定专用。
信息如有变更, 恕不另行通知。

安捷伦对本资料可能存在的错误或由于提供、展示或使用本资料所造成的间接损失不承担任何责任。

© 安捷伦科技(中国)有限公司, 2015
2015年10月14日, 中国出版
5991-6294CHCN



Agilent Technologies