

# 使用 QuickProbe GC/MS 进行无需样品前处理的法医学快速分析工作流程

## 作者

Luis A. Cuadra-Rodriguez  
安捷伦科技有限公司

## 摘要

本应用简报介绍使用 Agilent QuickProbe GC/MS 系统在无需样品前处理的条件下进行毒品分析的简单快速工作流程，可在一分钟内对查获毒品的复杂样品（包括大麻食品、黑色焦油海洛因和“神奇蘑菇”）进行分析。

## 前言

对各种样品中化合物鉴定的快速分析需求日益增加，对查获毒品而言更是如此<sup>[1, 2]</sup>。在犯罪实验室筛查过程中，对批量样品中毒品和其他化学品的阳性鉴定至关重要。常规毒品分析通常需要样品前处理，包括溶出、稀释和多种基于试剂的分析，以区分毒品类型，然后采用气相色谱/质谱 (GC/MS) 或其他技术进行分析确认<sup>[3, 4]</sup>。QuickProbe GC/MS 演示了一种无需样品前处理的简单快速分析工作流程。

## 实验部分

### 样品

本文分析了各种毒品样品，包括片剂处方药（氧可酮和维柯丁）以及刑事案件中查获的黑色焦油海洛因、“神奇蘑菇”和大麻食品（“曲奇饼干”）等毒品（图 1）。

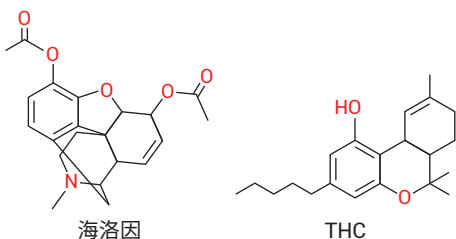


图 1. 本研究中测试的两种毒品化合物的化学结构

### 仪器

QuickProbe 组件安装在 GC/MS 系统 GC 顶部的检测器插槽上（图 2）。它包含一个与大气连通的加热进样口，采用恒定氦气流以防止空气侵入。系统使用快速加热（最高 16 °C/s 或 960 °C/min）的短毛细管色谱柱 (Agilent J&W DB-1ht, ~1.5 m × 0.25 mm, 0.10 μm)，可在一分钟之内实

现基本色谱分离。用玻璃探针（图 3）接触单个样品（液体、固体和粉末），将其引入 QuickProbe 进样口进行 3 到 6 秒蒸发，然后用 GC/MS 采集数据。几乎无需样品前处理。采用标准 GC/MS 数据分析软件包 (Agilent MassHunter 定性分析、定量分析和未知物分析软件) 以及 NIST 或 Wiley 谱库进行搜索，实现化合物鉴定。

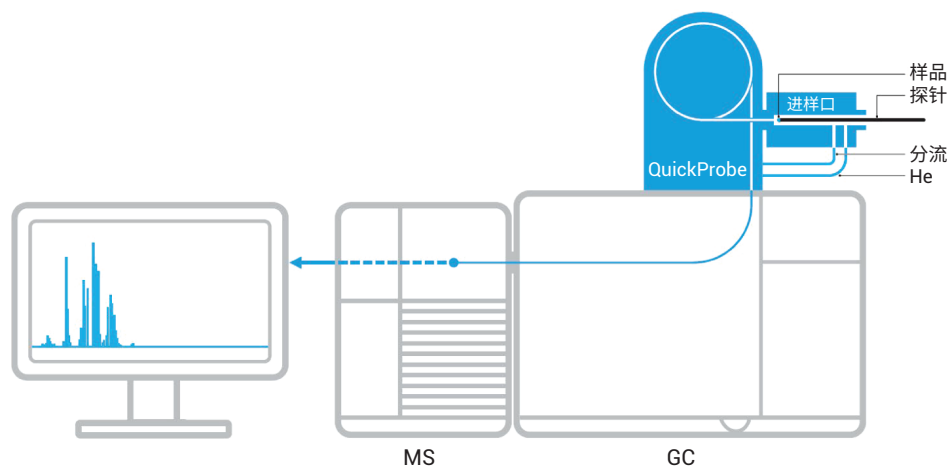


图 2. Agilent QuickProbe GC/MS 系统配置示意图

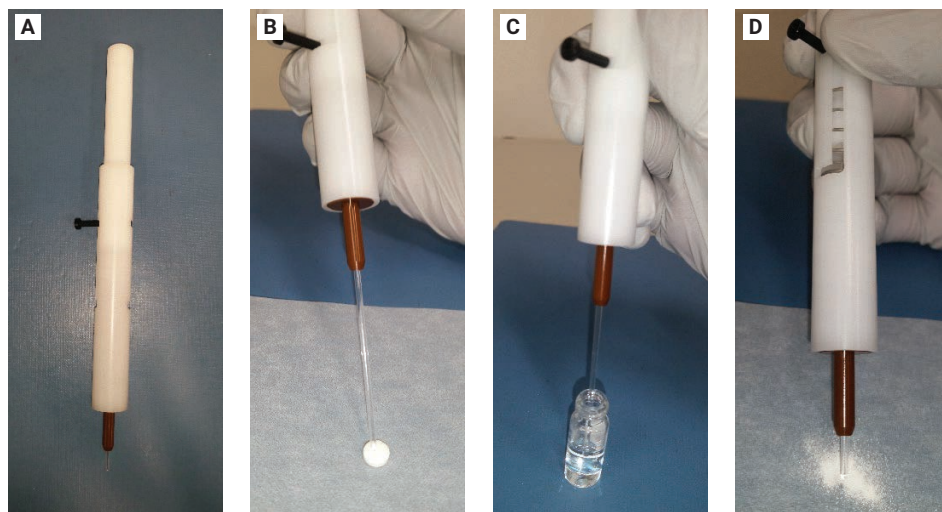


图 3. 样品前处理包括用探针支架内的玻璃探针 (A) 接触样品，包括如下方式: B) 固体 (片剂)、C) 液体或 D) 粉末 (粉碎片剂)

## 结果与讨论

无需样品前处理，在 1 分钟内对粉碎维柯丁片剂（5:300 mg 氢可酮:对乙酰氨基酚）进行分析，得到两种主要色谱分离组分，即对乙酰氨基酚和氢可酮，从而展示了 QuickProbe GC/MS 的性能（图 4）。此外，即使氢可酮仅占对乙酰氨基酚重量的不到 2%，这两种活性成分也以 > 90 的 NIST 谱库匹配得分得到鉴定。

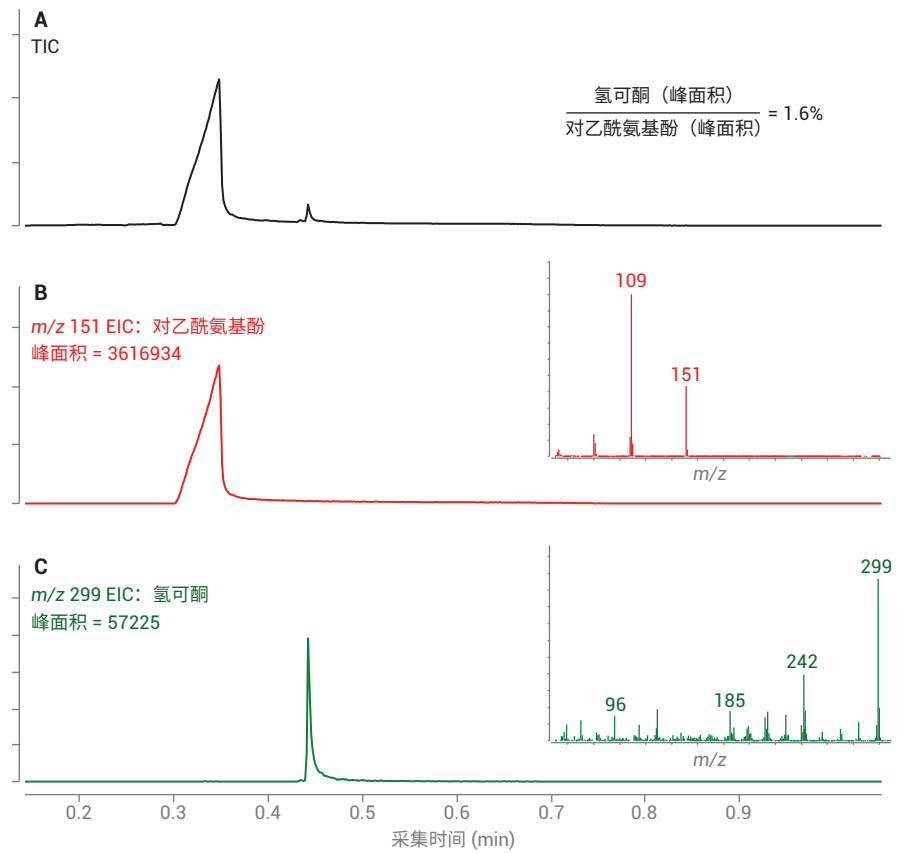


图 4. 在约 1 分钟内分析粉碎维柯丁片剂（5:300 mg 氢可酮:对乙酰氨基酚）。A) 总离子流图 (TIC)。提取离子色谱图 (EIC): 对乙酰氨基酚  $m/z$  151 (B), 氢可酮  $m/z$  299 (C)。两个组分的 NIST 谱库匹配得分均 > 90

将快速分析与极少的样品前处理、基本色谱分离和谱库搜索相结合，可以开发出适合法医学应用的简单工作流程（图 5）。不到五分钟的快速筛选工作流程包括以下分析步骤：

1. 系统空白
2. 探针空白
3. 样品
4. 系统空白

图 5 显示了使用该工作流程对氧可酮片剂的分析。空白运行显示了背景峰，如邻苯二甲酸盐和有机酸。样品提取谱图被鉴定为氧可酮，NIST 谱库匹配得分为 93。最终系统空白显示系统恢复到正常背景水平，已准备好进行下一次筛查分析。

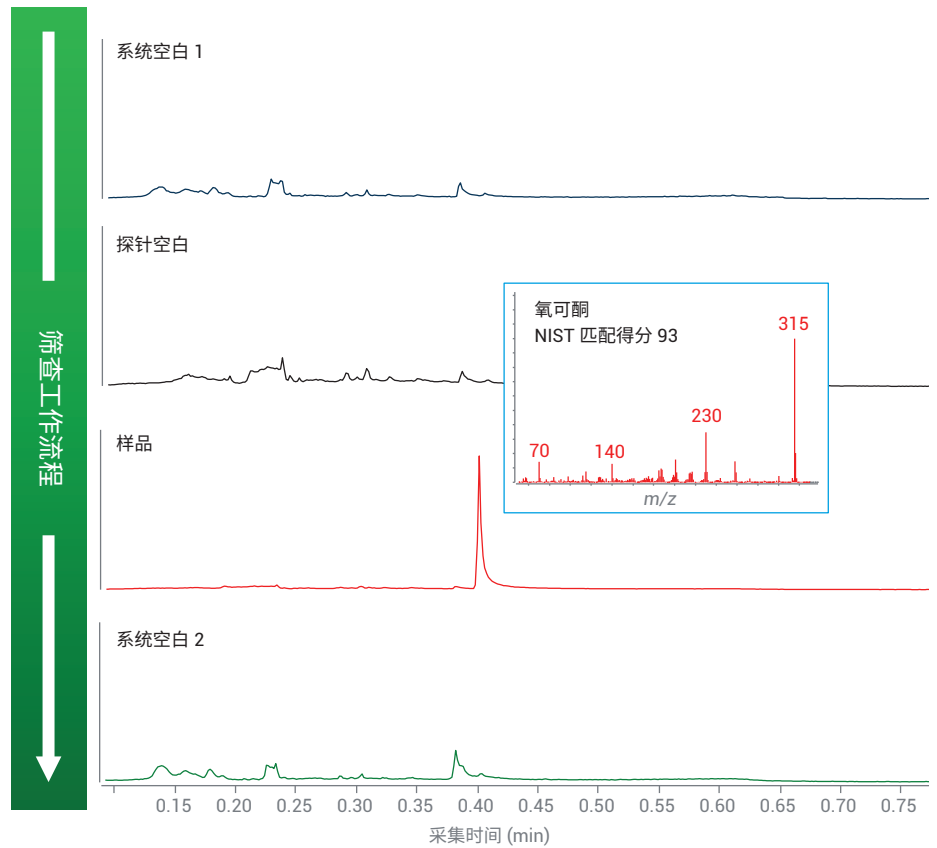


图 5. 5 分钟内的氧可酮片剂筛查工作流程分析

快速工作流程适用于分析法医学案件中查获的毒品样品。图 6 显示了使用 MassHunter 未知物分析软件分析大麻食品 (“曲奇饼干”)、黑色焦油海洛因和 “神奇蘑菇”。请注意, 主要组分和次要组分均鉴定出高 NIST 谱库匹配得分。例如, 大麻食品的分析显示样品中有 THC/屈大麻酚、大麻环萜酚和胆固醇。黑色焦油海洛因样品中鉴定出海洛因、乙酰可待因、6-单乙酰吗啡、罂粟碱和诺斯卡品。在 “神奇蘑菇” 分析中鉴定出脱磷酸裸盖菇素, 尽管它只是一个小峰。表 1 显示了各种查获毒品样品和片剂的结果汇总。

表 1. 法医学案件样品和处方药的筛查分析结果汇总

样品	化合物	NIST 谱库匹配	分子式
黑色焦油海洛因	乙酰可待因	97	C <sub>20</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>4</sub>
	6-单乙酰吗啡 (6-MAM)	98	C <sub>19</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>4</sub>
	二乙酰吗啡 (海洛因)	98	C <sub>21</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>5</sub>
	罂粟碱	93	C <sub>20</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>4</sub>
	诺斯卡品	98	C <sub>22</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>7</sub>
大麻食品	屈大麻酚	99	C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>
	大麻环萜酚	89	C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>
“神奇蘑菇”	脱磷酸裸盖菇素	90	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O
可卡因粉末	可卡因	98	C <sub>17</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>4</sub>
	四咪唑	97	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> S
红色片剂	西地那非 (万艾可)	92	C <sub>22</sub> H <sub>30</sub> N <sub>6</sub> O <sub>4</sub> S
片剂 (阿普唑仑)	阿普唑仑	99	C <sub>17</sub> H <sub>13</sub> ClN <sub>4</sub>
片剂 (氧可酮)	氧可酮	97	C <sub>18</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>4</sub>
片剂 (维柯丁)	对乙酰氨基酚	99	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>
	氢可酮	96	C <sub>18</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>3</sub>

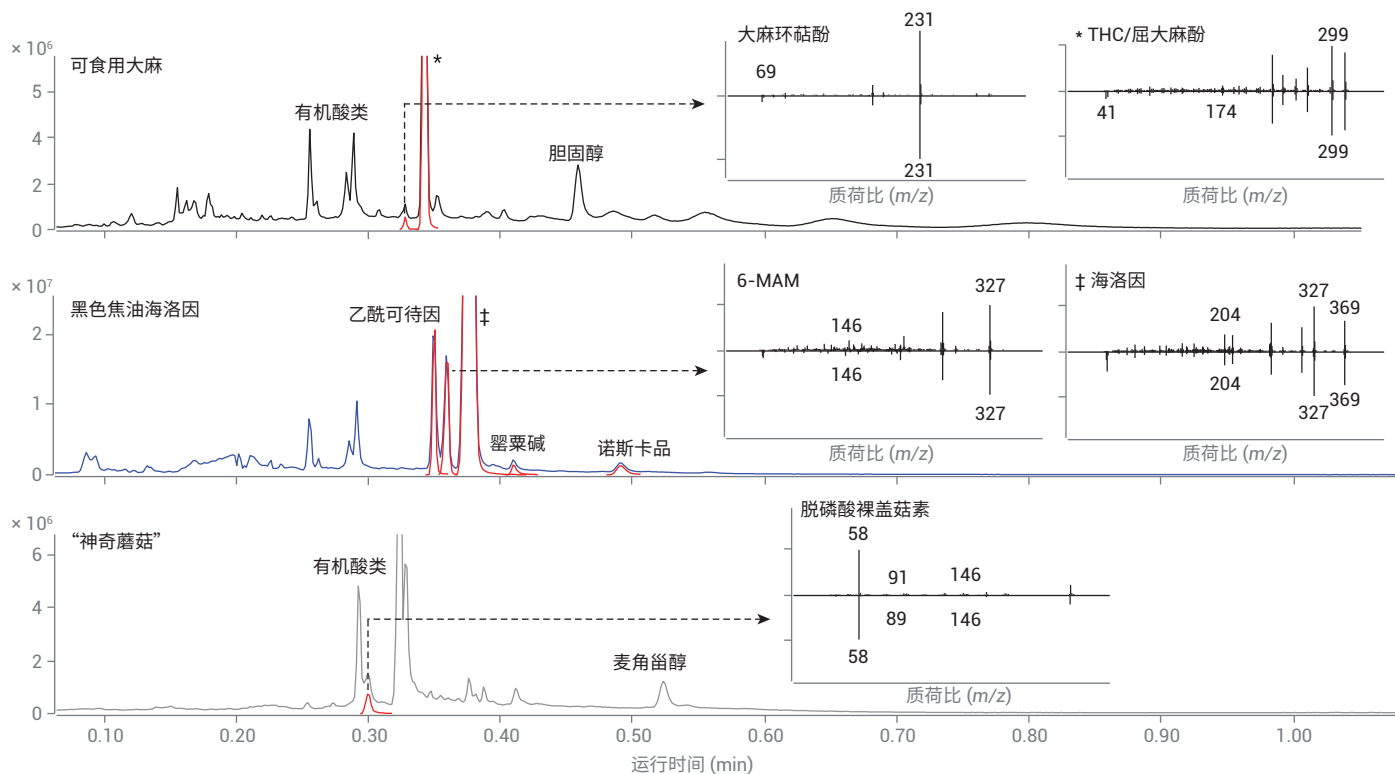


图 6. 各种法医学案件样品 (包括大麻食品、黑色焦油海洛因和 “神奇蘑菇”) 的一分钟内快速筛查分析 (无需样品前处理)。图中显示每个样品中主要目标化合物的比较谱图 (从头到尾)

主要组分的阳性鉴定可以指导分析人员选择特定的样品前处理流程或确证方法，如片剂分析示例所述。此外，复杂样品（例如大麻食品、黑色焦油海洛因和“神奇蘑菇”）查获毒品的一分钟内筛查分析可节省大量时间。

## 结论

本研究展示了不同物理状态（固体、凝胶或粉末）的大量片剂和查获毒品样品筛查能够实现快速的样品分析，几乎无需样品前处理。采用 NIST 谱库匹配和已知来源对毒品成分进行阳性鉴定，从而实现快速分析。为筛查提供了适合法医学应用的快速工作流程，其中包括分析：1) 系统空白；2) 探针空白；3) 样品；4) 系统空白。

## 参考文献

1. Demoranville, L. T.; Brewer, T. M. Ambient Pressure Thermal Desorption Ionization Mass Spectrometry for the Analysis of Substances of Forensic Interest, *Analyst* **2013**, *138*, 5332. (DOI: 10.1039/c3an00726j)
2. Deimler, R. E.; *et al.* Direct Analysis of Drugs in Forensic Applications Using Laser Ablation Electrospray Ionization-Tandem Mass Spectrometry (LAESI-MS/MS), *Analytical Methods* **2014**, *6*, 4810. (DOI: 10.1039/c4ay01043d)
3. Scientific Working Group for the Analysis of Seized Drugs (SWGDRUG) Recommendations, United States Department of Justice Drug Enforcement Administration, 7th ed., **2016** (<http://www.swgdrug.org/Documents/SWGDRUG%20Recommendations%20Version%207-1.pdf>)
4. Scientific Working Group for the Analysis of Seized Drugs (SWGDRUG) Supplemental Document SD-2, United States Department of Justice Drug Enforcement Administration, (<http://www.swgdrug.org/Documents/Supplemental%20Document%20SD-2.pdf>)

查找当地的安捷伦客户中心：

[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://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](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)

在线询价：

[www.agilent.com/chem/erfq-cn](http://www.agilent.com/chem/erfq-cn)

[www.agilent.com](http://www.agilent.com)

用于司法鉴定。

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。