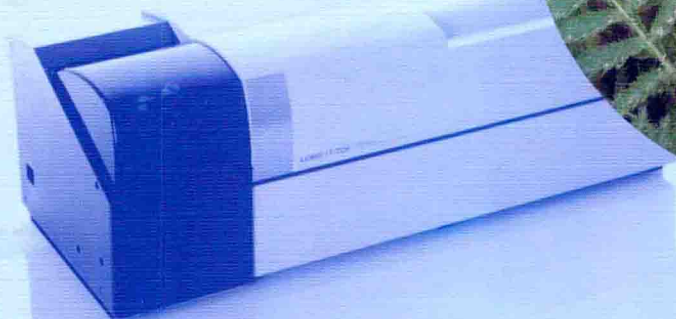
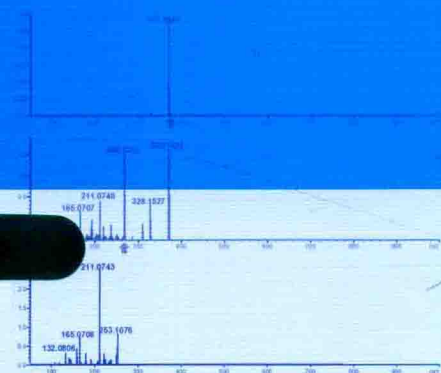


Common Narcotic Drug Detection
LCMS-IT-TOF Analytical Manual

常见毒品离子阱飞行时间 质谱分析手册

高利生 曹磊 赵阳 等著



化学工业出版社

Common Narcotic Drug Detection
LCMS-IT-TOF Analytical Manual

常见毒品离子阱飞行时间 质谱分析手册

高利生 曹磊 赵阳 等著



化学工业出版社

· 北京 ·

本书重点阐述了离子阱飞行时间质谱 (LCMS-IT-TOF) 在毒品鉴定方面的应用, 详细介绍了利用离子阱飞行时间质谱仪对 49 种毒品样品进行多级质谱分析的谱图, 总结其裂解途径。每种样品包含了其基本的信息, 如名称、分子式、结构式、CAS 登记号、分子量、熔点、沸点、性状等等, 以及各种质谱条件下的多级质谱标准谱与裂解途径, 能够为毒品分析工作者提供有价值的帮助与参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

常见毒品离子阱飞行时间质谱分析手册 / 高利生, 曹磊, 赵阳等
著. —北京: 化学工业出版社, 2014.3

ISBN 978-7-122-19709-2

I. ①常… II. ①高…②曹…③赵… III. ①毒品-离子
阱-质谱法-手册 IV. ①R996-62 ②O657.63-62

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2014) 第 021897 号

责任编辑: 李晓红

装帧设计: 刘丽华

责任校对: 宋 玮 王 静

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 刷: 北京永鑫印刷有限责任公司

装 订: 三河市宇新装订厂

720mm×1000mm 1/16 印张 8 1/4 字数 158 千字 2014 年 8 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

定 价: 58.00 元

版权所有 违者必究

前 言

据联合国毒品和犯罪问题办公室统计,目前全球共有 130 多个国家和地区存在毒品消费问题,170 多个国家和地区涉及毒品犯罪,每年毒品交易额达到 8000~10000 亿美元,占全球贸易总额的 10%,这一数字高于石油和天然气工业的收入,与全球军火贸易额相差无几。全球化的毒品问题已对人类的生存和发展构成极大威胁,毒品与艾滋病、恐怖活动并称为人类社会的三大公害。我国《2013 年中国禁毒报告》显示,截至 2012 年底,全国吸毒人员为 209.8 万人。全国公安机关共破获毒品刑事案件 12.2 万起,抓获毒品犯罪嫌疑人 13.3 万名,同比分别上升 19.8% 和 18.1%;毒品的泛滥直接危害人民的身心健康,并给经济发展和社会进步带来巨大的威胁。

新世纪以来,在发展中国家和新兴的工业国家,新型毒品滥用的增长趋势十分明显。在我国,毒品的种类也越来越多,目前我国公布的《麻醉药品和精神药品品种目录》(2007 年版)中,管制药物已经增加到 255 种之多,而受国际控制的管制药物达 600 余种(凡是加入联合国公约的国家,毒品范围就应扩大到国际控制范围)。同时,随着化学合成技术的改进,不法毒贩通过化学修饰改变传统管制药品的物质结构使其转变为不受管制的新型毒品(一般称为“策划药”或“新的精神活性物质”),以达到躲避国家法律制裁的目的,而这些通过化学修饰后的新型毒品往往对中枢神经系统的作用更强、成瘾性更大,从而给社会造成更大的危害。

这些新型毒品的出现给案件的侦破增加了一定的难度。尤其是毒品的有效成分和含量分析鉴定对于公安业务和法庭科学来说是至关重要的。

在众多的检测方法中,质谱法无疑成为毒品分析的必备手段,除目前普遍应用的气相色谱质谱联用技术(GC-MS)外,随着大气压电离(API)技术的成熟,液相色谱质谱联用仪(LC-MS)也越来越多出现在毒品实验室中,并应用于各项检测中。除了离子源技术的进步外,LC-MS 的质量分析器也在不断的优化,质谱仪的

质量准确度、灵敏度和分辨率也在不断提高，特别是多种串联质谱仪及杂交质谱仪的出现，进一步提高了质谱仪的性能及应用范围。串联质谱仪以三重四极杆质谱仪为代表，可以获得二级质谱图，得到产物离子信息，从而获得一定的化合物结构信息。但是，一般三重四级杆质谱只能给出质量数整数位或小数点后一位，在这种情况下进行分子式预测会获得几百甚至更多的备选分子式数目。杂交质谱仪以四级杆飞行时间串联质谱仪（Q-TOF）、离子阱飞行时间液质联用仪（LCMS-IT-TOF）等为代表，LCMS-IT-TOF 是将离子阱的多级质谱功能（MSⁿ）以及飞行时间质谱的高灵敏度、高分辨率以及高质量数准确度的优势结合在一起的液质联用仪，最多可获得 10 级高分辨率质谱数据，它使得 LC-MS 类仪器的性能进一步提升，广泛应用于实际工作中。有鉴于此，公安部物证鉴定中心毒品检验技术处与岛津公司合作，计划使用离子阱飞行时间质谱，针对 600 余种毒品及易制毒化学品，建立毒品多级质谱数据库，以备毒品分析工作者参考。目前该项工作已完成了 49 种毒品及易制毒化学品的多级质谱采集与分析，为建立完整质谱库的目标奠定了初步的基础。

本书是基于公安部物证鉴定中心与岛津公司的合作成果，对已利用 LCMS-IT-TOF 完成的 49 种毒品及易制毒化学品的多级质谱谱图进行汇总，总结化合物的基本信息及其特征的质谱裂解规律，期望能够应用于已知毒品的快速准确定性分析、新型合成毒品的鉴别，以及根据毒品中的杂质等成分分析进行毒品溯源的工作中。

此项工作由赵阳、郑琿、高利生等毒品分析专家与董静、马超、李月琪、杨桂香、黄涛宏、曹磊等仪器应用专家共同合作完成。相信这项工作一定能够为毒品分析工作者提供有价值的帮助与参考。

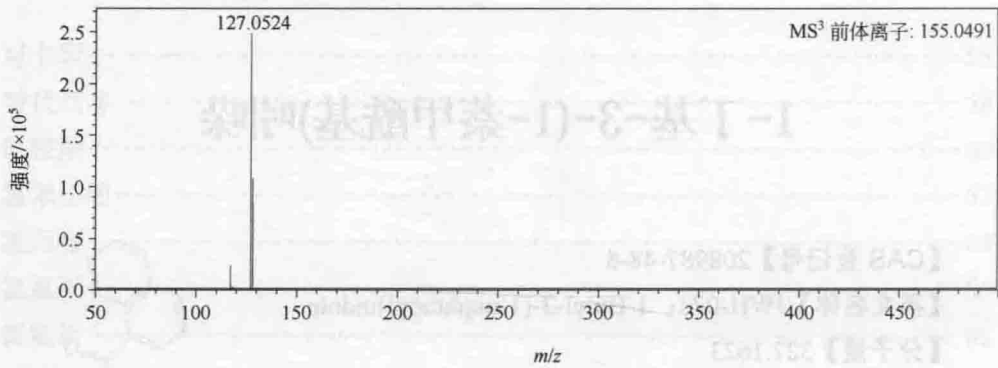
编者

2014 年 1 月

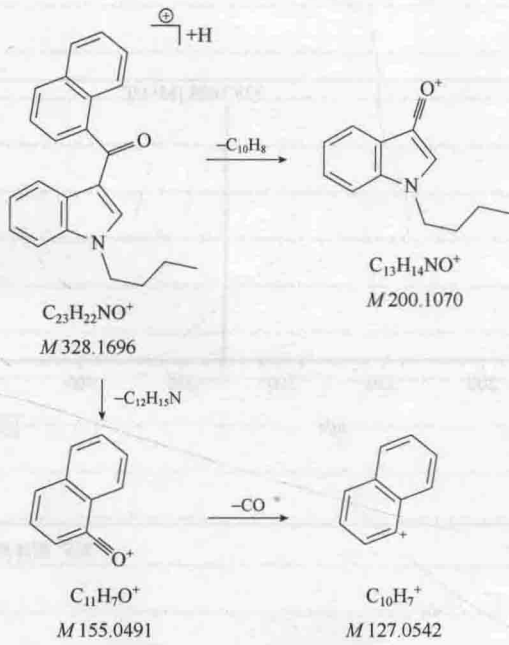
目 录

1-丁基-3-(1-萘甲酰基)吡啶	1
1-戊基-3-(1-萘甲酰基)吡啶	3
N-异丙基苄胺	5
阿米替林	7
阿普唑仑	10
艾司唑仑	12
安眠酮	14
安替比林	16
氨基比林	18
奥沙西洋	20
苯海拉明	22
苯甲酰爱康宁	24
茶碱	26
地西洋	29
蒂巴因	31
杜冷丁	33
二氢埃托啡	35
非那西汀	37
芬布芬	39
芬太尼	41
奋乃静	43
海洛因	45
甲基苯丙胺	48
咖啡因	50
可待因	52

可卡因	55
劳拉西洋	58
氯胺酮	60
氯苯那敏	62
氯丙嗪	64
氯氮平	66
氯氮革	68
氯硝西洋	71
麻黄碱	73
吗啡	76
美沙酮	79
那可汀	81
扑热息痛	83
普鲁卡因	85
曲马多	87
三氟拉嗪	89
三唑仑	91
伪麻黄碱	93
硝西洋	96
乙酰可待因	98
异丙嗪	100
异烟肼	102
罂粟碱	104
右美沙芬	107
附录 I 分析条件说明	110
附录 II 仪器介绍	111
中文索引	112
英文索引	118
CAS 登记号索引	123
分子式索引	125
分子量索引	126



多级质谱主要裂解途径推测



1-戊基-3-(1-萘甲酰基)吲哚

【CAS 登记号】209414-07-3

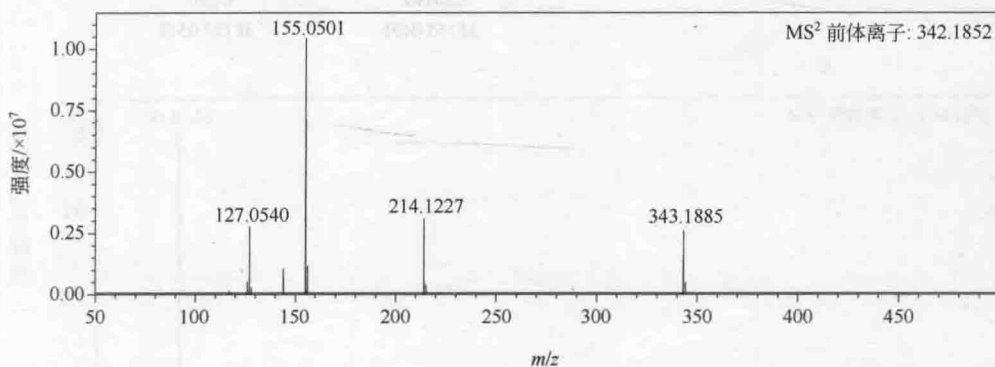
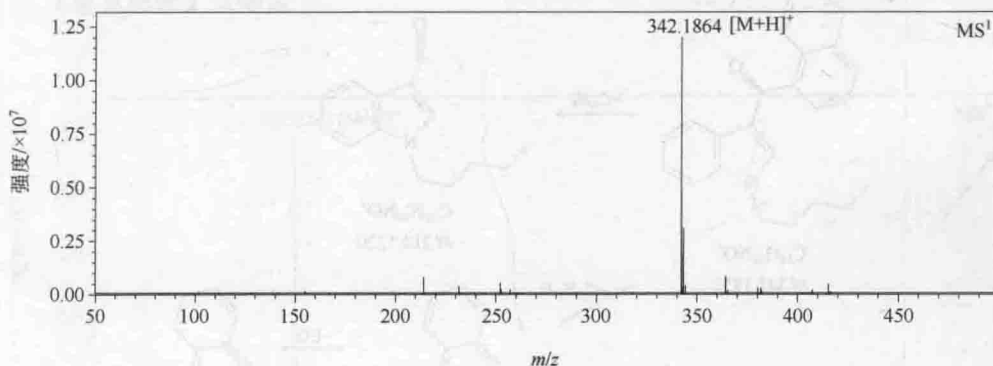
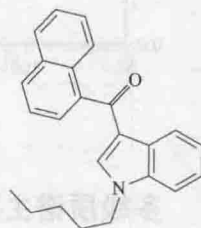
【英文名称】JWH-018; 1-Pentyl-3-(1-naphthoyl)indole

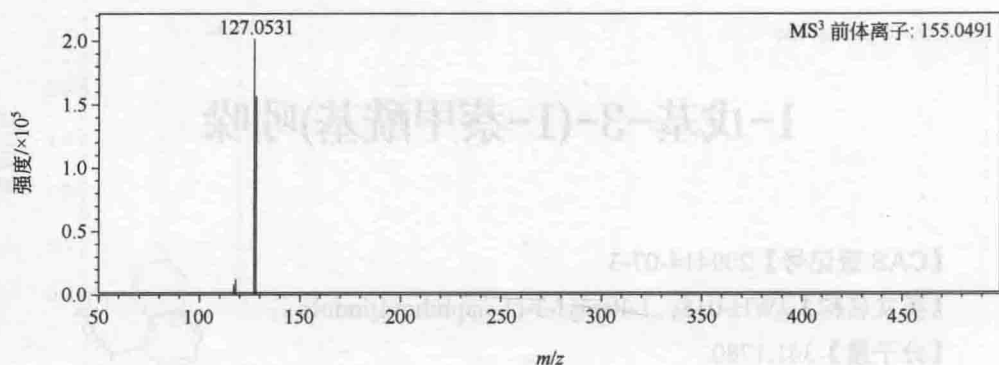
【分子量】341.1780

【分子式】 $C_{24}H_{23}NO$

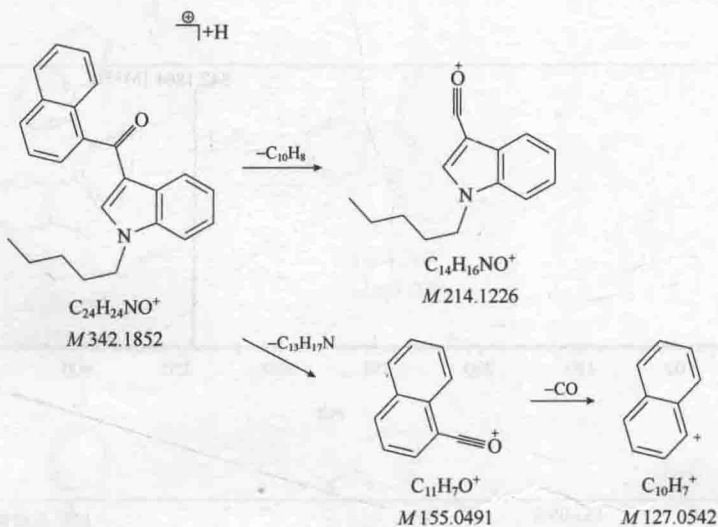
【熔点】51.9°C

【性状】灰白色粉末





多级质谱主要裂解途径推测



N-异丙基苄胺

【CAS 登记号】102-97-6

【系统命名】1-甲基-4-哌啶甲酸甲酯

【别名】*N*-苄基异丙胺；*N*-异丙基苄基胺

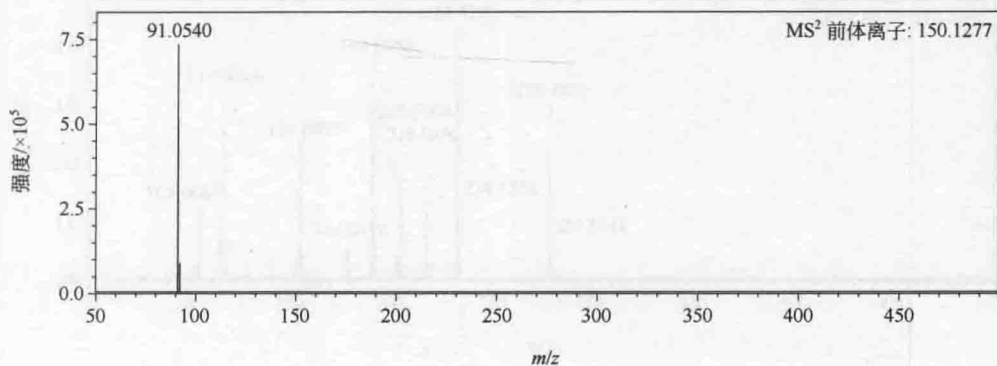
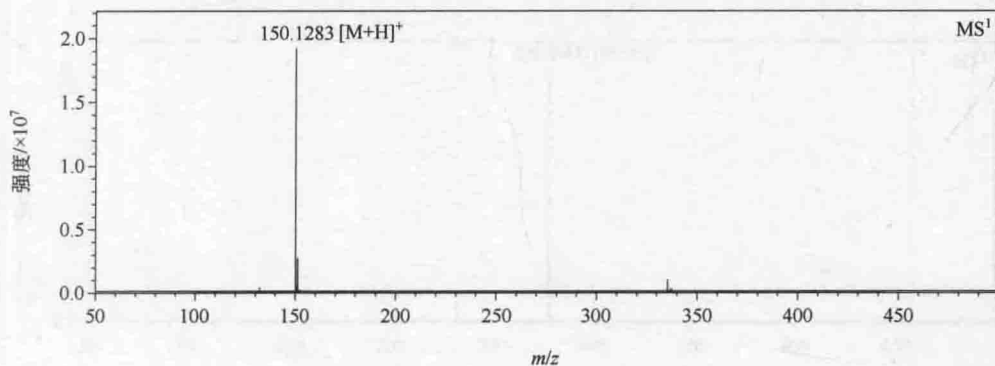
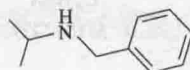
【英文名称】*N*-(1-Methylethyl)-benzenemethanamine

【分子量】149.1205

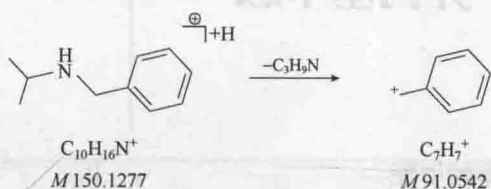
【分子式】 $C_{10}H_{15}N$

【熔点】199~200℃

【常见形式】盐酸盐



多级质谱主要裂解途径推测



***N*-异丙基苄胺盐酸盐**

[CAS 登记号] 18354-85-3

[英文名称] *N*-Benzylisopropylamine hydrochloride

[外观] 白色晶体



阿米替林

【CAS 登记号】50-48-6

【系统命名】*N,N*-二甲基-3-(10,11-二氢-5*H*-二苯并[*a,d*]环庚三烯-5-亚基)-1-丙胺

【别名】阿密替林；氨三环庚素；依拉维

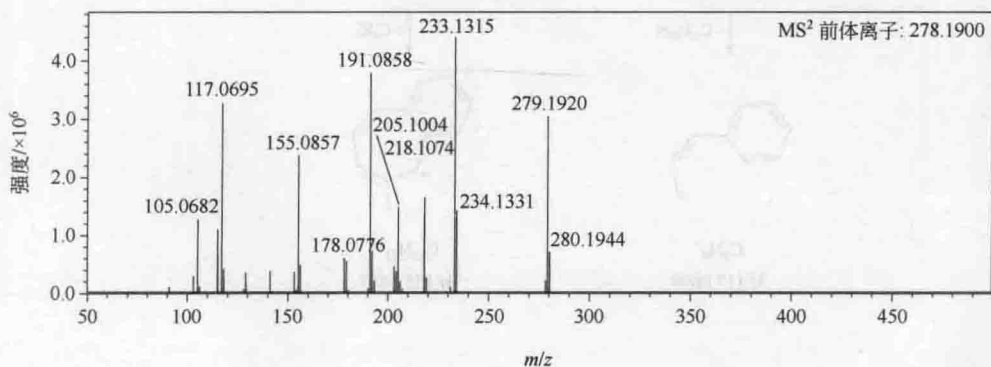
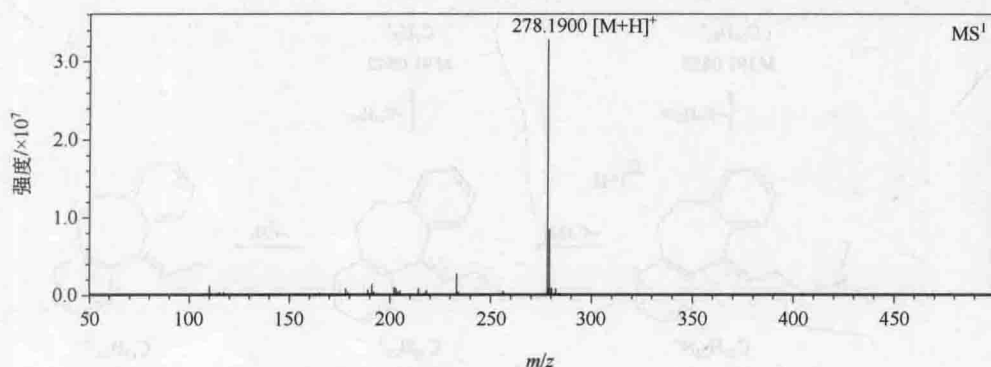
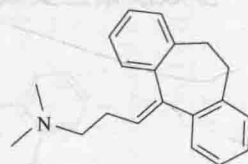
【英文名称】Amitriptyline; 1-Propanamine, 3-(10,11-dihydro-5*H*-dibenzo[*a,d*]-cyclohepten- 5-ylidene)-*N,N*-dimethyl

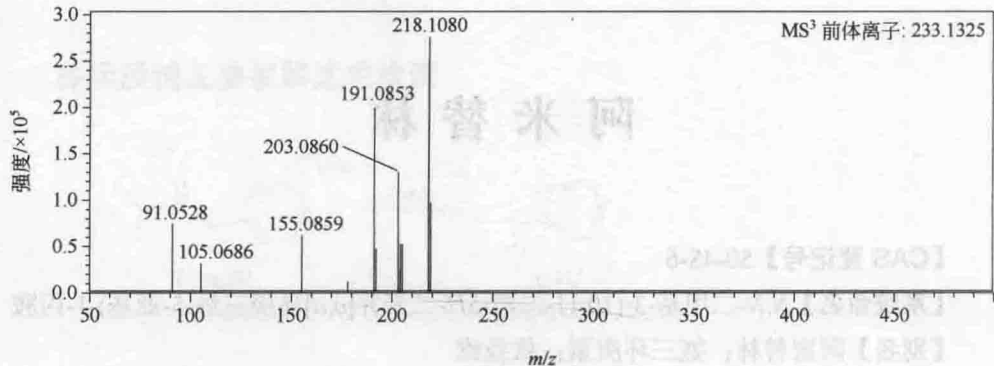
【分子量】277.1830

【分子式】 $C_{20}H_{23}N$

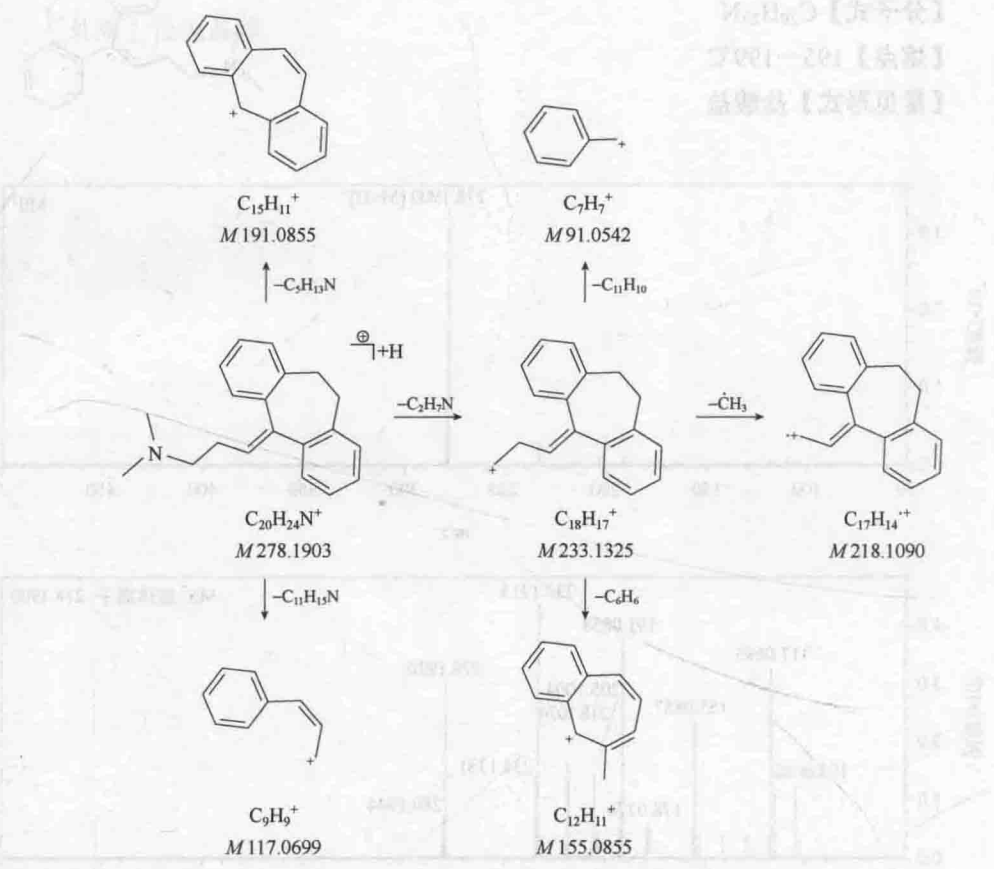
【熔点】195~199℃

【常见形式】盐酸盐





多级质谱主要裂解途径推测



阿米替林盐酸盐

[CAS 登记号] 549-18-8

[英文名称] Amitriptyline hydrochloride

[外观] 白色结晶粉末

[溶解性] 溶于水和乙醇

[类别] 中枢神经系统药物

[熔点] 197℃



阿普唑仑

【CAS 登记号】28981-97-7

【系统命名】1-甲基-6-苯基-8-氯-4*H*-[1,2,4]三唑[4,3-*a*][1,4]苯并二氮杂草

【别名】三唑安定

【英文名称】Alprazolam; 8-Chloro-1-methyl-6-phenyl-4*H*-[1,2,4]triazolo[4,3-*a*][1,4]benzodiazepine

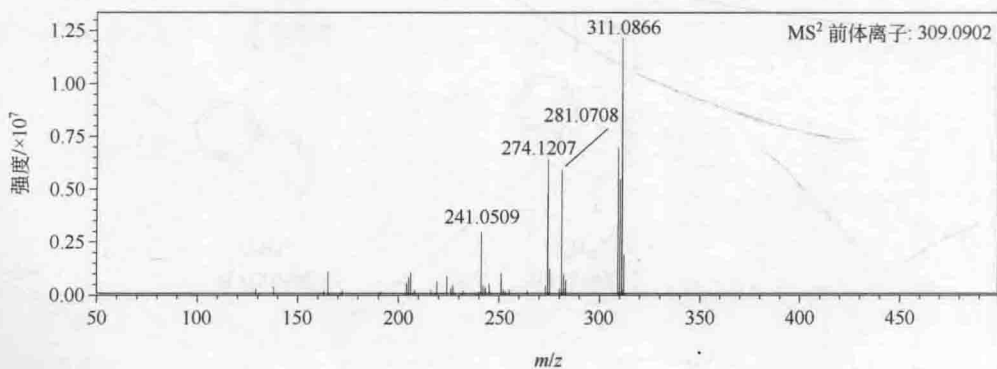
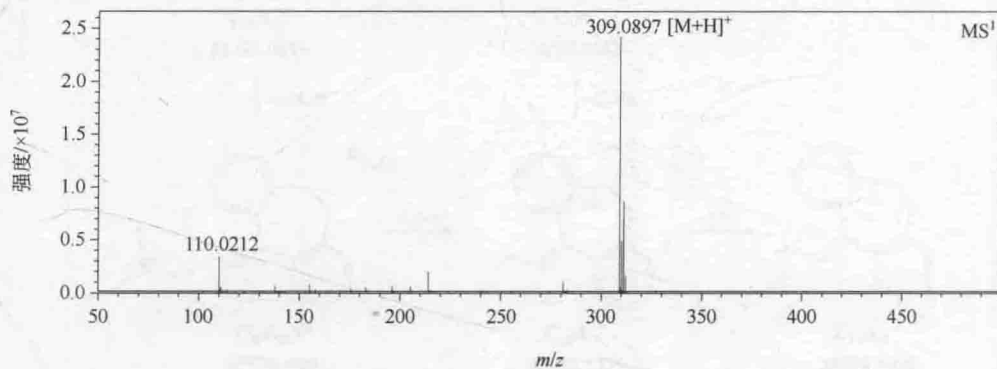
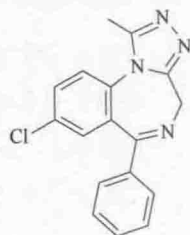
【分子量】308.0829

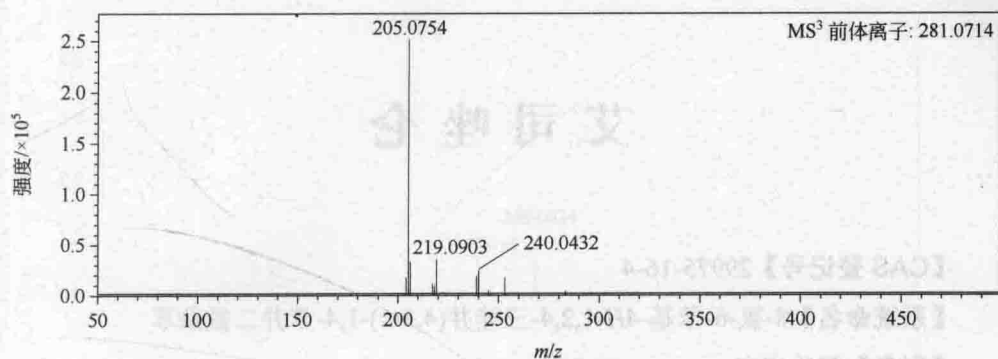
【分子式】C₁₇H₁₃ClN₄

【外观】白色结晶性粉末

【熔点】228~228.5℃

【溶解性】难溶于水，溶于氯仿、二氯甲烷





多级质谱主要裂解途径推测

