

违禁药品现场快检和特征谱分析

Abigail Koss and Veronika Pospisilova

TOFWERK, Boulder, CO, USA and Thun, Switzerland

刑侦部门通常需要对执法部门查获的可疑样品进行分析检测，以确定是否含有违禁成分，并判断其纯度和来源。准确鉴别违法药物和其他示踪物，并精确报告其浓度和来源地为执法部门追究刑事责任并定罪提供了必要证据。药物合成过程通常会伴生杂质，某些药物甚至会有意的“掺杂”来强化或改变药效。对这些所谓的‘杂’质进行鉴别也能对执法部门在判断药物原材料产地和运输链溯源上提供额外帮助。

快速检测痕量可卡因

TOFWERK Vocus 飞行时间质谱仪可实时在线对样品进行无损分析，无需繁琐的样品前处理，分离等步骤。图 1 展示了 Vocus CI 仪器对一份由当地执法部门提供的一份含有可卡因的袋装样品的测量结果。

TOFWERK Vocus 飞行时间质谱仪可实时在线对样品进行无损分析，无需繁琐的样品前处理，分离等步骤。

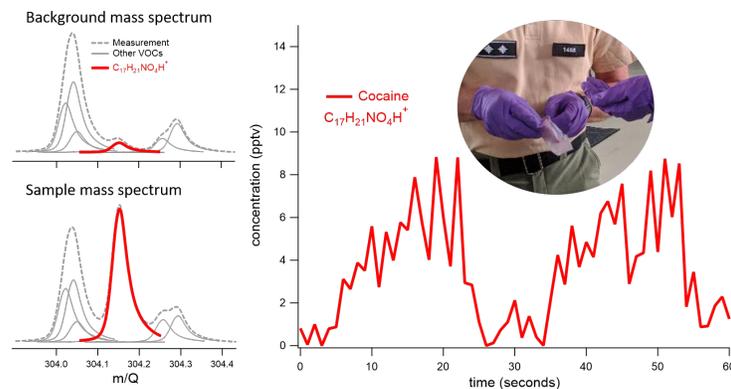


图 1，可卡因在 Vocus TOF 上的响应。将装有可卡因的小袋子在仪器进样口附近打开，仪器立即检测到了明显的 ppt 浓度的气态可卡因信号。基于 Vocus S 仪器的高质量分辨率 ($dm/m=6000$)，在谱图上可以准确无误的将可卡因相对应的峰 (304 Th , $\text{C}_{17}\text{H}_{21}\text{NO}_3 \cdot \text{H}^+$) 识别出来。

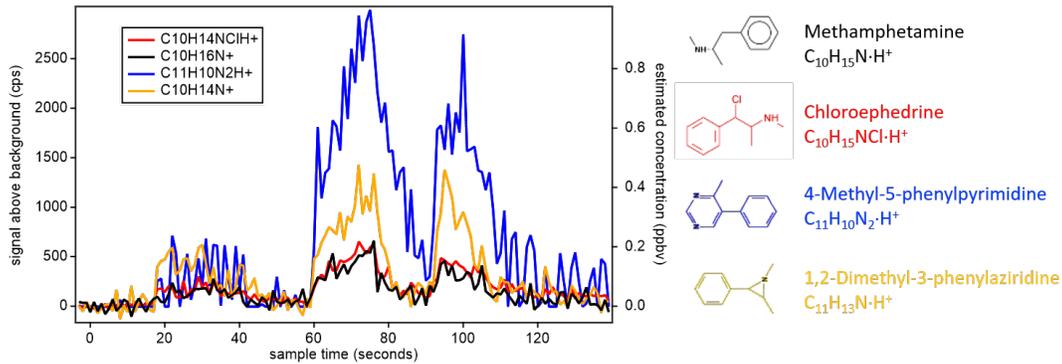


图2 甲基苯丙胺检测结果。在仪器进样口附近将一内含少量甲基苯丙胺的袋子在120秒内连续进行三次‘打开-关闭’的操作。左侧插图展示了甲基苯丙胺（黑色）和其他气态物质在这两分钟内的信号变化。通过Vocus高分辨率质谱提供的信号精确质量可得到这几种气态物质的元素组成，并结合相关文献中报道的甲基苯丙胺伴生杂质确定了右图中的物质成分。

图1展示了Vocus CI仪器对一份由当地执法部门提供的一份含有可卡因的袋装样品的测量结果。进样方式非常简单，只需打开袋子并将其放置于仪器进样口旁几秒后移除。值得说明的是，此次试验是在一个非实验室条件（车库）下进行的。车库背景大气中富含的汽油和其他烟雾物质并没有影响Vocus仪器在样品袋打开的瞬间就能准确捕捉到快速增长的可卡因信号（ $C_{17}H_{21}NO_3 \cdot H^+$ ）。Vocus仪器的高分辨率，在不采用色谱分析的条件下，让待测物分子信号在环境大气中众多VOCs环绕下“脱颖而出”。

甲基苯丙胺（冰毒）的特征谱图

一般来说，待测物在Vocus CI仪器上的信号响应是可预测的，因此无需复杂的数据库即可进行初步筛查。但违禁药品样

品除有效成分外还可能含有多种其他成分。例如，查获的违禁样品中90%以上都含有填料，合成过程中伴生二次产物或者其他掺杂物质。这些“杂质”化合物通常挥发性比药品本身高，其气态浓度也较高，也更容易被Vocus CI仪器‘闻’到，并成为不同药品的‘气味指纹库’的重要组成部分。各药品的特征谱图会因药品合成途径、有效成分浓度、药品储存条件、以及运输方法的不同而各异。通过对比数据库或者文献中已知杂质，会对药品鉴别的准确性加上一道保险。

以甲基苯丙胺为例，其合成途径可通过药物中独有的杂质进行判断。违禁甲基苯丙胺一般有六种合成路线可选，每一种都伴有其特有的二次产物。

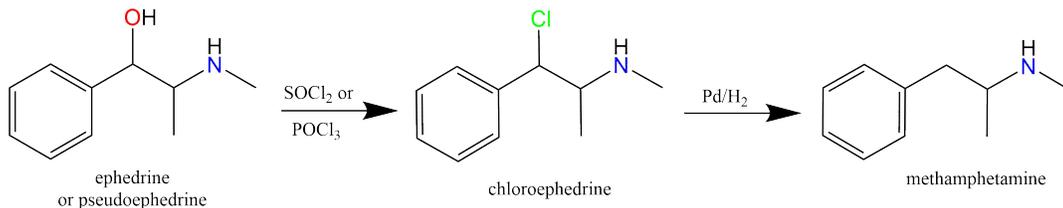


图3 Emde法甲基苯丙胺合成路线图。2-苯基-3-甲基环氮丙啶和氯麻黄碱都是Emde法合成方法的特征指标物。

以甲基苯丙胺为例，其合成途径可通过药物中独有的杂质进行判断。违禁甲基苯丙胺一般有六种合成路线可选，每一种都伴有其特有的二次产物。在图 2 Vocus 仪器对疑似甲基苯丙胺样品的测量结果中，可以看到除了甲基苯丙胺信号之外，还有其他的伴生二次产物也被清晰的检测到了。仅对于这个样品而言，所含有杂质的浓度比甲基苯丙胺还要高！

此外，飞行时间质谱仪是全谱同时测量，所测得的同位素峰特征也可以作为物种鉴别的重要参考。图 3 中 Emde 法的示踪物氯麻黄碱($C_{10}H_{15}NCl$)就可根据氯原子的同位素分布特征进行精准定性分析。

参考文献

1. Des and Ismail, Impurity Profiling of Amphetamine and Methamphetamine Using Gas Chromatography Mass Spectrometry (GCMS) Harmonised Methods, Sains Malaysiana, 46 (1), 149-156, 2017.
2. Ko et al., The impurity characteristics of methamphetamine synthesized by Emde and Nagai method, Forensic Science International, 170 (2-3), 142-147, 2007.

Contact

china@tofwerk.com
©TOFWERK 2020